

**Technische Universität München  
Fachgebiet Hydromechanik**

# **Direkte Simulation und Modellierung des Mikromischens bei hohen Schmidt Zahlen**

Florian Schwertfirm

Vollständiger Abdruck der an der Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

**Doktor-Ingenieurs**

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender:

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. E. Rank

Prüfer der Dissertation:

1. Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. M. Manhart
2. Univ.-Prof. W. H. Polifke, Ph. D (CCNY)

Die Dissertation wurde am 08.07.2008 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen am 17.11.2008 angenommen.



# Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es, die turbulente Vermischung von wässrigen Lösungen bis zu den molekularen Skalen zu beschreiben. Dazu wurden in dieser Arbeit grundlegende Untersuchungen und Modellierungsarbeiten für die Kombination einer direkten numerischen Simulation des Strömungsfeldes mit der gefilterten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion-Simulation (FDF) eines Skalarfeldes für hohe Schmidt Zahlen durchgeführt. Diese Kombination aus Ansätzen hat den Vorteil, dass nur der Mikromischterm in der Transportgleichung der FDF modelliert werden muss und konvektiver Transport sowie chemische Reaktion geschlossen vorliegen.

Für die Erzeugung einer Datenbasis und Untersuchung der turbulenten Vermischung bei hohen  $Sc$  wurde eine volle DNS der Strömung und der Vermischung in einem turbulenten Kanal bei  $Re_\tau = 180$  und bei den  $Sc = 3, 10, 25$  und  $49$  durchgeführt. Diese hohen  $Sc$  erforderten für die volle Auflösung des Skalarfeldes Gitter mit bis zu siebenfach höherer Auflösung (in einer Raumrichtung) als für die Strömungssimulation bei  $Re_\tau = 180$  selbst. Um diese Simulationen performant auf der HLRB und HRLB2 des Leibniz-Rechenzentrums durchführen zu können, wurde ein Verfahren zur Verbesserung der Auflösungseigenschaften des verwendeten numerischen Verfahrens entwickelt sowie eine konservative hierarchische Gitterstruktur in den Strömungslöser implementiert. Eine Analyse der DNS Daten zeigte Unzulänglichkeiten in gebräuchlichen Modellierungsansätzen für die Vermischung, wie z. B. dem "mechanical to scalar time scale ratio", und lieferte eine funktionale Bestimmungsgleichung für den Massetransferkoeffizienten.

Mit diesen DNS Daten wurde eine a priori Untersuchung des "linear mean square estimation" (LMSE) Modells für den Mikromischterm in der FDF Transportgleichung durchgeführt. Es konnte gezeigt werden, dass die gebräuchliche Definition der Mischfrequenz  $\Omega_M$  in der LMSE Modellierung ausreicht um sowohl das statistische als auch das instantane Verhalten des Mikromischterms gut abzubilden. Voraussetzung dafür ist eine statistisch als auch instantan korrekte Abbildung der skalaren subfilter Dissipationsrate. Um die subfilter Dissipationsrate zu modellieren, wurde eine a priori Analyse der DNS Daten der einzelnen Terme der Transportgleichung der subfilter Dissipationsrate durchgeführt. Es konnte gezeigt werden, dass die Beiträge der molekularen Diffusion sowie der Konvektion vernachlässigbar sind. Die verbleibenden Terme der Transportgleichung konnten mit bekannten Ansätzen aus der Literatur durch Anpassung von Konstanten erfolgreich modelliert werden. Eine a posteriori Analyse der modellierten Transportgleichung entlang Lagrange'scher Bahnen zeigte sehr gute Ergebnisse.



# Abstract

This thesis deals with the analysis, simulation and modelling of turbulent mixing in aqueous solutions at high Schmidt numbers. For modelling the turbulent mixing, a combination of direct numerical simulation (DNS) of the flow field and a filtered density function (FDF) simulation of the scalar field is proposed. In this way, only the term describing the small scale diffusive mixing in the FDF transport equation has to be modelled, whereas the convective transport of the FDF as well as the non linear reaction term are closed.

For the analysis of turbulent mixing, DNS of turbulent channel flow at  $Re_\tau = 180$  and  $Sc = 3, 10, 25$  and  $49$  have been conducted. At these  $Sc$ , a full resolution of the scalar field requires a grid which is up to seven times finer than the grid for the DNS of the flow field alone. For this reason special numerical techniques, as hierarchical grid and high resolution schemes were developed and applied in combination with a massive parallel computation to simulate these flow problems.

The resulting detailed data of turbulent mixing at high  $Sc$  was used to test the "linear mean square estimation" (LMSE) model for the micromixing term in the FDF transport equation a priori. It could be shown that the LMSE model performs, in combination with a DNS of the flow field, very well and is capable of capturing the first and second order statistics as well as the dynamics of the micromixing term, as long as the subgrid scalar dissipation rate is predicted accurately. To develop a model for the subgrid scalar dissipation rate, its transport equation was analysed and it could be shown that the diffusive and turbulent convective term are insignificant. For each remaining term model expressions were proposed. With the DNS data of the channel flow the model constants for each term could be determined. An a posteriori analysis of the modelled transport equation for the subgrid scalar dissipation rate showed a very good agreement with the DNS data.



# Vorwort

Ich möchte mich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Allen voran bei meinen Eltern, für die Bildung immer eines der höchsten Güter war, und bei meinen Brüdern, die meine Neugier immer bei Laune hielten.

Besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Prof. Michael Manhart, dessen DFG-Antrag überhaupt die Grundlage für das Gelingen dieser Arbeit bereitete und der über all die Jahre ein exzellenter Betreuer war.

Bei Prof. Rainer Friedrich möchte ich mich für die sehr guten Bedingungen im Fachgebiet Strömungsmechanik während der ersten beiden Jahren meiner Promotion bedanken. Wird in Hochglanzbroschüren und Festtagsreden versucht einen Elite Begriff herbei zu beschwören, herrschte dort ein reger Besuch von Gastwissenschaftlern und wurde seit langem auf international anerkanntem Niveau gearbeitet. Für mich bedeutete dies ein erstklassiges Arbeitsumfeld.

Das wichtigste am Arbeitsumfeld sind die Kollegen und da möchte ich mich bei allen, sowohl vom Fachgebiet Strömungsmechanik als auch vom Fachgebiet Hydromechanik, bedanken, insbesondere bei Johannes Kreuzinger, obwohl er mich mit seinen bohrenden Fragen, gerade wenn er recht hatte (was oft genug der Fall war), ganz schön reizen konnten. Hilfreich waren sie immer.

Zuletzt möchte ich noch der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Förderung meines Projektes, allen Kollegen im SPP 1141 und vor allem der Gruppe um Prof. Peukert für die rege Zusammenarbeit sowie dem Leibniz Rechenzentrum für die Bereitstellung von Rechenzeit, Ressourcen und Betreuung danken.





# Inhaltsverzeichnis

<b>Zusammenfassung</b>	<b>I</b>
<b>Vorwort</b>	<b>V</b>
<b>Nomenklatur</b>	<b>XV</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Grundlagen der Strömungsmechanik und des Stofftransports</b>	<b>7</b>
2.1 Grundgleichungen der Strömungsmechanik . . . . .	7
2.2 Grundgleichung des Stofftransports . . . . .	12
2.3 Turbulenz und deren Skalen . . . . .	15
2.4 Turbulenter Stofftransport bei hohen Schmidt Zahlen . . . . .	21
<b>3 Strömungsmechanik des Mischens</b>	<b>27</b>
3.1 Skalen der Vermischung und Mischzeit . . . . .	27
3.2 Vermischung als Abbau skalarer Varianz . . . . .	30
3.3 Modellierung der Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate . . . . .	32
<b>4 Numerische Simulation inkompressibler Strömungen</b>	<b>39</b>
4.1 Verwendete Finite Volumen Methode . . . . .	39
4.2 Rekonstruktions-Methode zur Verbesserung der Auflösungseigenschaften . . . . .	41
4.2.1 Das Rekonstruktions-Verfahren . . . . .	41
4.2.2 Ergebnisse der Auflösungsverbesserung . . . . .	49
4.2.3 Zusammenfassung . . . . .	50
4.3 Hierarchische Gitterstruktur für die Simulation des Skalartransportes bei hohen Schmidt-Zahlen . . . . .	54
4.4 Auswertung von gefilterten und subfilter Größen entlang Lagrange'scher Bahnen . . . . .	54
<b>5 DNS des passiven Skalartransports in turbulenter Kanalströmung bei hohen Sc</b>	<b>57</b>
5.1 Numerische Parameter . . . . .	57
5.2 Validierung . . . . .	59
5.3 Statistiken erster und zweiter Ordnung . . . . .	61
5.4 Instantane Skalarfelder . . . . .	62
5.5 Bilanzierung der skalaren Varianz . . . . .	65
5.6 Längenmaße im Skalarfeld . . . . .	67
5.7 Turbulente Schmidt Zahl und Mischzeiten . . . . .	69
5.8 Stoffübergangskoeffizient . . . . .	72
5.9 Zusammenfassung . . . . .	76

<b>6</b>	<b>Gefilterte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion</b>	<b>77</b>
6.1	Transportgleichung der gefilterten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion . . . . .	77
6.2	Lösung der FDF Transportgleichung . . . . .	80
6.2.1	Stochastische Prozesse - Markov Prozess . . . . .	80
6.2.2	Fokker-Planck Gleichung . . . . .	81
6.2.3	Wiener Prozess . . . . .	83
6.2.4	Stochastische Differentialgleichung . . . . .	84
6.2.5	Monte-Carlo-Methode . . . . .	86
<b>7</b>	<b>Modellierung des Mikromischens</b>	<b>91</b>
7.1	Das Linear Mean Square Estimation Modell für den Mikromischterm . . . . .	91
7.1.1	Die Mischfrequenz des LMSE Modells in der DNS-FDF Methode . . . . .	93
7.1.2	A priori Analyse des LMSE-Modells in der DNS-FDF Methode . . . . .	97
7.2	Modellierung der Mischfrequenz . . . . .	112
7.2.1	Transportgleichungen der skalaren Varianz und der skalaren Dissipation	114
7.2.2	A priori Analyse der Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate	118
7.2.3	Modellierung der Transportgleichung der subfilter Dissipationsrate . . . . .	122
7.3	Analyse der Modellierung der subfilter Dissipationsrate . . . . .	133
7.3.1	Analyse mittels Scatterplots . . . . .	133
7.3.2	Analyse einzelner Lagrange Partikelbahnen . . . . .	136
7.3.3	Analyse der Ensemble gemittelten, modellierten subfilter Dissipationsrate . . . . .	141
7.3.4	Zusammenfassung . . . . .	141
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>143</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>151</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>152</b>
A.1	FDF-Transportgleichung . . . . .	152
A.1.1	Definition und Eigenschaften der FDF . . . . .	152
A.1.2	Herleitung der FDF Transportgleichung . . . . .	153

# Tabellenverzeichnis

- 5.1 Parameter der Gitter für die Simulationen. . . . . 58
- 5.2 Parameter des Wandgesetzes und Dicke der konduktiven Unterschicht aus den  
DNS Daten. . . . . 73



# Abbildungsverzeichnis

2.1	Eindimensionales turbulentes Energiespektrum . . . . .	19
2.2	Eindimensionales turbulentes skalares Energiespektrum . . . . .	24
2.3	Zeitlicher Verlauf der Konzentration in einer 2D Mischungsschicht; links $Sc = 1$ rechts $Sc = 100$ . . . . .	25
3.1	Unvermischter Anfangszustand und voll vermischter Endzustand . . . . .	28
3.2	Eindimensionales turbulentes skalares Energiespektrum . . . . .	28
4.1	Versetzte Variablenanordnung und zwei Kontrollvolumina (gestrichelt) . . . . .	40
4.2	(a): Filtertransferfunktionen $\hat{G}$ für zentrale Differenz zweiter Ordnung (durchgezogene Linie), $\hat{G}'$ für Trapezregel (Punkte) und Simpsonregel (Striche). (b): Zusammengesetzte Transferfunktion $\hat{Q}_1(\hat{G}')\hat{G}$ für Trapezregel (Punkte) und Simpsonregel (Striche) sowie ursprüngliche Filtertransferfunktionen $\hat{G}$ (durchgezogene Linie). . . . .	44
4.3	(a): Filtertransferfunktionen $\hat{G}$ für zentrale Differenz zweiter Ordnung (durchgezogene Linie), $\hat{Q}_1(\hat{G}')\hat{G}$ (Punkte), $\hat{Q}_3(\hat{G}')\hat{G}$ (Striche) und $\hat{Q}_4(\hat{G}')\hat{G}$ (Strich-Punkt), alle mit der Simpsonregel; (b): $\hat{G}$ (durchgezogene Linie), $\hat{Q}_2(\hat{G}')\hat{G}$ mit der Simpsonregel (Punkte), $\hat{Q}_2(\hat{G}'_1\hat{G}'_2)\hat{G}$ mit 6ter Ordnung (Striche) und $\hat{Q}_4(\hat{G}')\hat{G}$ mit der Simpsonregel (Strich-Punkt) . . . . .	45
4.4	Modifizierte Wellenzahl der ersten Ableitung: (a) zweiter Ordnung explizit (2E, Punkte), vierter Ordnung explizit (4E, Striche) und $\hat{Q}_2(\hat{G}')\hat{G}$ (QM2, Strich-Punkt); (b) sechster Ordnung explizit (6E, Punkte), $\hat{Q}_4(\hat{G}')\hat{G}$ (QM4, Striche) und vierter Ordnung kompakt (4C, Strich-Punkt) . . . . .	47
4.5	Numerische Lösung von Gleichung (4.18) mit Initiallösung (4.19) nach einer Periode; (a) analytische Lösung (Linie). zweiter Ordnung explizit (2E, Punkte), vierter Ordnung kompakt (4C, Striche) und Rekonstruktions-Methode QM2 (Strich-Punkt); (b) vergrößerter Bereich nahe des steilen Gradienten, analytische Lösung (Linie), Rekonstruktions-Methode QM2 (Punkte), Rekonstruktions-Methode QM4 (Striche), vierter Ordnung kompakt (4C, kleine Punkte) und vierter Ordnung explizit (4E, Strich-Punkt) . . . . .	50
4.6	Schematische Darstellung des Differenzensterns für die konservative Interpolation . . . . .	51
4.7	Schematische Darstellung der divergenzfreen Geschwindigkeiten aus dem ersten Interpolationsschritt (schwarz) und den Geschwindigkeiten des zweiten Interpolationsschritts (gestrichelt) . . . . .	52
4.8	Filtertransferfunktionen der Filteroperationen (4.28) $k/(N/2) = 1$ entspricht der maximalen, auf dem Gitter darstellbaren Wellenzahl. . . . .	55

5.1	(a): Vergleich der rms Werte der Geschwindigkeiten zwischen Grob- und Feingitter und Referenzdaten von Kim et al. [26]; (b): Vergleich der rms Werte zwischen den Gittern A mit D. . . . .	60
5.2	Eindimensionales skalares Energiespektrum (Linien) und eindimensionales Energiespektrum der $u$ -Geschwindigkeitskomponente (Symbole) in Hauptströmungsrichtung bei $z^+ = 180$ , normalisiert mit den Kolmogorov Skalen und der Amplitude der ersten Mode. . . . .	60
5.3	(a): Vergleich der mittleren Skalarprofile (b): Vergleich der rms Werte des Skalars bei verschiedenen $Sc$ . . . . .	61
5.4	(a): turbulenter Massenstrom $\langle u'\Phi' \rangle$ bei verschiedenen $Sc$ (b): turbulenter Massenstrom $\langle w'\Phi' \rangle$ bei verschiedenen $Sc$ . . . . .	62
5.5	Instantanes Skalarfeld in der $y$ - $z$ -Ebene . . . . .	63
5.6	Instantanes Skalarfeld in der $y$ - $z$ -Ebene . . . . .	63
5.7	Instantanes Skalarfeld in der $x$ - $z$ -Ebene . . . . .	64
5.8	Bilanz der einzelnen Terme der Transportgleichung der skalaren Varianz, (a) $Sc = 3$ , (b) $Sc = 10$ . . . . .	66
5.9	Bilanz der einzelnen Terme der Transportgleichung der skalaren Varianz, (a) $Sc = 25$ , (b) $Sc = 49$ . . . . .	66
5.10	Eindimensionales skalares Energiespektrum in Hauptströmungsrichtung bei $z^+ = 180$ , normalisiert mit den Kolmogorov Skalen, der Amplitude der ersten Mode und $\sqrt{Sc}$ (a) und $Sc^{1/3}$ (b). . . . .	67
5.11	Taylor Mikromaß der Geschwindigkeit $\lambda$ und des Skalars $\lambda_g$ zusammen mit der Skalierung $\lambda/Sc^{1/3}$ bei $Sc = 3$ und $Sc = 10$ (a) und $Sc = 25$ und $Sc = 49$ (b) . . .	68
5.12	(a) Zeitmaßverhältnis (5.10) und (b) Mikromischzeit (3.8) . . . . .	70
5.13	(a) Grenzwert der turbulenten Diffusivität an der Wand, (b) turbulente Schmidt Zahl nahe der Wand . . . . .	71
5.14	(a) Mittleres Skalarprofil mit Wandgesetz (5.12) und (5.13), (b) Dicke der konduktiven Unterschicht in Abhängigkeit von $Sc$ . . . . .	73
5.15	(a) Stoffübergangskoeffizient über $Sc$ bei $Re_\tau = 180$ , (b) Stoffübergangskoeffizient über $Sc$ bei $Re_\tau = 100$ und $Re_\tau = 5000$ . . . . .	75
6.1	Zeitliche Entwicklung der Gleichung (6.16) mit $A = 1.0$ und $B = 1.0$ . Anfangsbedingung war ein Dirac-Impuls $p(x_0, t_0) = \delta(x)$ . . . . .	83
6.2	4 Realisationen der zeitlichen Entwicklung der Zufallsgröße $x(t)$ nach Gleichung (6.19) mit $A = 1.0$ und $B = 1.0$ . Anfangsbedingung war ein Dirac-Impuls $p(x_0, t_0) = \delta(x)$ . . . . .	85
7.1	Filtertransferfunktionen der Filteroperationen auf den entsprechenden Gittern. $N_{Ag}$ ist die Anzahl der Gitterpunkte (in einer Dimension) auf Gitter <b>A</b> -grob. $k/(N_{Ag}/2) = 1$ entspricht der maximalen, darstellbaren Wellenzahl auf Gitter <b>A</b> -grob. . . . .	100
7.2	Zeitlicher Verlauf der linken (DNS) und rechten Seite (LMSE) von Gleichung (7.33) entlang ausgewählter Lagrange Bahnen bei $Sc = 3$ und $Sc = 10$ . . . . .	101
7.3	Zeitlicher Verlauf der linken (DNS) und rechten Seite (LMSE) von Gleichung (7.33) entlang ausgewählter Lagrange Bahnen bei $Sc = 25$ und $Sc = 49$ . . . . .	102
7.4	Scatterplot der Gleichung (7.33) und Winkelhalbierende bei $Sc = 3$ (a) und $Sc = 10$ (b). . . . .	103

7.5	Scatterplot der Gleichung (7.33) und Winkelhalbierende bei $Sc = 25$ (a) und $Sc = 49$ (b). . . . .	103
7.6	Scatterplot des Mittelwerts (a) und der Varianz (b) von Gleichung (7.33) bei $Sc = 3$ , Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen . . . . .	104
7.7	Scatterplot des Mittelwerts (a) und der Varianz (b) von Gleichung (7.33) bei $Sc = 10$ , Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen . . . . .	104
7.8	Scatterplot des Mittelwerts (a) und der Varianz (b) von Gleichung (7.33) bei $Sc = 25$ , Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen . . . . .	105
7.9	Scatterplot des Mittelwerts (a) und der Varianz (b) von Gleichung (7.33) bei $Sc = 49$ , Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen . . . . .	105
7.10	Zeitlicher Verlauf der linken (DNS) und rechten Seite (LMSE) von Gleichung (7.33) entlang einer ausgewählten Lagrange Bahn bei $Sc = 3$ und $Sc = 25$ , mit und ohne molekularer Diffusion skalarer Varianz in der Definition der Mischfrequenz . . . . .	106
7.11	Scatterplot der Gleichung (7.33) und Winkelhalbierende bei $Sc = 3$ (a) und $Sc = 25$ (b). Definition von $\Omega_M$ nach Gleichung (7.12). . . . .	107
7.12	Scatterplot der Varianz von Gleichung (7.33) bei $Sc = 3$ (a) und $Sc = 25$ (b), Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen. Schwarze Dreiecke mit molekularer Diffusion, weiße Quadrate ohne molekularer Diffusion . . . . .	107
7.13	Scatterplot der fluktuierenden Dissipation über der totalen Dissipation bei $Sc = 10$ (a) und $Sc = 49$ (b). Stichproben entlang Lagrange Bahnen. . . . .	110
7.14	Scatterplot der fluktuierenden Diffusion über der totalen Diffusion bei $Sc = 3$ (a) und $Sc = 49$ (b). Stichproben entlang Lagrange Bahnen. . . . .	110
7.15	Zeitlicher Verlauf der linken (LHS) und rechten Seite (RHS) von Gleichung (7.61) entlang einer ausgewählten Lagrange Bahn bei $Sc = 3$ und $Sc = 10$ . . . . .	119
7.16	(a): Bilanzierung der rechten Seite von Gleichung (7.62) bei $Sc = 3$ auf Gitter <b>A</b> (Linien) und Gitter <b>B</b> (Symbole);(b): Berechnung der Destruktion nach Gleichung (7.63) auf Gitter <b>A</b> (Linie) und Gitter <b>B</b> (Symbol) . . . . .	120
7.17	PDF der einzelnen Terme der rechten Seite von Gleichung 7.61 bei $Sc = 3$ (a) und $Sc = 10$ (b). . . . .	121
7.18	PDF der einzelnen Terme der rechten Seite von Gleichung 7.61 bei $Sc = 25$ (a) und $Sc = 49$ (b). . . . .	122
7.19	Modellierung von $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65), linke Seite aus DNS $\langle -D_\epsilon \rangle$ (Linie) rechte Seite Modell $\langle C_d \epsilon \Phi^2 / \overline{\Phi^2} \rangle$ (Symbole) . . . . .	124
7.20	Modellierung von $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65), linke Seite aus DNS $\langle -D_\epsilon \rangle$ (Linie) rechte Seite Modell $\langle C_d \epsilon \Phi^2 / \overline{\Phi^2} \rangle$ (Symbole) . . . . .	124
7.21	Anteil der Korrelation am Gesamtterm (Gl. 7.66) in Abhängigkeit von $Sc$ . . . . .	125
7.22	Modellierung von $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65), linke Seite aus DNS $\langle -D_\epsilon \rangle$ (Linie) rechte Seite Modell $C_d \langle \epsilon \Phi \rangle^2 / \langle \overline{\Phi^2} \rangle$ (Symbole), Ensemble gemittelte Eingangsgrößen . . . . .	126
7.23	Modellierung von $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73), linke Seite aus DNS (Linie) rechte Seite Modell (Symbole) . . . . .	129
7.24	Modellierung von $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73), linke Seite aus DNS (Linie) rechte Seite Modell (Symbole) . . . . .	129
7.25	Anteil der Korrelationen am Modellterm, (a) Gleichung (7.75), (b) Gleichung (7.76)	130
7.26	Modellierung von $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73), linke Seite aus DNS (Linie) rechte Seite Modell (Symbole) mit den Modellkonstanten $C_D = 0.02596$ und $C_s = 1.0$ . . . . .	131

7.27	Modellierung von $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73), $x$ -Achse aus DNS, $y$ -Achse Modell, Korrelationskoeffizient 0.88 bei $Sc = 3$ und 0.84 bei $Sc = 10$ . . . . .	134
7.28	Modellierung von $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73), $x$ -Achse aus DNS, $y$ -Achse Modell, Korrelationskoeffizient 0.82 bei $Sc = 25$ und 0.76 bei $Sc = 49$ . . . . .	134
7.29	Modellierung von $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65), $x$ -Achse aus DNS, $y$ -Achse Modell; Korrelationskoeffizient 0.93 bei $Sc = 3$ und 0.88 bei $Sc = 10$ . . . . .	135
7.30	Modellierung von $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65), $x$ -Achse aus DNS, $y$ -Achse Modell; Korrelationskoeffizient 0.91 bei $Sc = 25$ und 0.93 bei $Sc = 49$ . . . . .	135
7.31	Zeitlicher Verlauf von Produktion und Dissipation in der vereinfachten Transportgleichung (7.64) aus DNS und Modell sowie der Vergleich der tatsächlichen mit der berechneten Dissipation $\epsilon_\Phi^+(t)$ entlang zweier ausgewählter Lagrange Bahnen bei $Sc = 3$ . . . . .	137
7.32	Zeitlicher Verlauf von Produktion und Dissipation in der vereinfachten Transportgleichung (7.64) aus DNS und Modell sowie der Vergleich der tatsächlichen mit der berechneten Dissipation $\epsilon_\Phi^+(t)$ entlang zweier ausgewählter Lagrange Bahnen bei $Sc = 10$ . . . . .	138
7.33	Zeitlicher Verlauf von Produktion und Dissipation in der vereinfachten Transportgleichung (7.64) aus DNS und Modell sowie der Vergleich der tatsächlichen mit der berechneten Dissipation $\epsilon_\Phi^+(t)$ entlang zweier ausgewählter Lagrange Bahnen bei $Sc = 25$ . . . . .	139
7.34	Zeitlicher Verlauf von Produktion und Dissipation in der vereinfachten Transportgleichung (7.64) aus DNS und Modell sowie der Vergleich der tatsächlichen mit der berechneten Dissipation $\epsilon_\Phi^+(t)$ entlang zweier ausgewählter Lagrange Bahnen bei $Sc = 49$ . . . . .	140
7.35	Vergleich der aus den Lagrange-Bahnen gebildeten Ensemble Mittelwerten $\langle \epsilon_\Phi \rangle(z)$ aus der DNS und aus der Lösung der Modellgleichung (7.78) . . . . .	141
7.36	Vergleich der aus den Lagrange-Bahnen gebildeten Ensemble Mittelwerten $\langle \epsilon_\Phi \rangle(z)$ aus der DNS und aus der Lösung der Modellgleichung (7.78) . . . . .	142



# Nomenklatur

## Lateinische Symbole

$A$	: Edukt in einer Reaktionsgleichung
$A_i$	: Konstante im Arrhenius Gesetz
$B$	: Edukt in einer Reaktionsgleichung
$c$	: Schallgeschwindigkeit
$c_p$	: spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
$c_v$	: spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
$C$	: Produkt in einer Reaktionsgleichung
$d_{i,j,k}$	: diskrete Divergenz in der Zelle $i, j, k$
$dW$	: inkrement des Wiener Prozesses
$D_\Phi$	: spektrale Dissipation skalarer Energie
$D_t$	: turbulente Diffusion skalarer Varianz
$D_m$	: molekulare Diffusion skalarer Varianz
$e$	: innere Energie
$E$	: totale spezifische Energie
$E_i$	: Aktivierungsenergie
$\hat{E}$	: Fourier Koeffizient der turbulenten kinetischen Energie
$E_\Phi$	: spektrale skalare Energie
$f$	: Frequenz
$f_i$	: Volumenkraft in $x_i$ -Richtung
$f$	: vorwärts Reaktion
$F_{\vec{k}}$	: Fourier Operator bei der Wellenzahl $\vec{k}$
$g$	: Erdbeschleunigung
$g_k = \frac{\partial \Phi}{\partial x_k}$	: Skalargradient in $x_k$ Richtung
$G$	: Filter Operator
$\hat{G}_i$	: Fourier Koeffizient des konvektiven Terms in $i$ -Richtung
$h$	: spezifische Enthalpie
$I$	: Anzahl möglicher Reaktionen
$I$	: Einheitsoperator
$J'^+ = \Gamma \frac{\partial^2 \Phi'^+}{\partial x_i^2}$	: molekulare subfilter Diffusion
$k = \frac{1}{2} \langle u'_i u'_i \rangle$	: turbulente kinetische Energie (TKE)
$k_i$	: Reaktionsrate
$\vec{k}$	: Wellenzahlvektor
$k_{\eta K}$	: Kolmogorov Wellenzahl

$k_{\eta B}$	: Batchelor Wellenzahl
$K_i$	: Gleichgewichtskonstante
$K^+ = \frac{1}{Sc} \frac{\partial \Phi}{\partial z^+} \frac{1}{\Phi_W - \Phi_C}$	: Dimensionsloser Massentransferkoeffizient
$Kn = \frac{\lambda}{l}$	: Knudsen Zahl
$l$	: Länge
$L_0$	: Länge (Referenz-)
$p$	: Druck
$p$	: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
$P_\Phi$	: Produktion skalarer Energie bzw. Varianz
$P$	: Wahrscheinlichkeit
$P_L$	: gefilterte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
$q_i$	: Komponente des Wärmeleitungs-Vektor
$Q_M$	: Approximative Dekonvolutionsbeziehung mit $m$ Termen
$r$	: rückwärts Reaktionsrichtung
$R$	: Allgemeine Gaskonstante
$R = \frac{k}{\epsilon} \frac{\epsilon_\Phi}{\langle \Phi'^2 \rangle}$	: mechanical to scalar time scale ratio
$R_i$	: Reaktionsgeschwindigkeit
$R_{ij}$	: Zweipunktskorrelationstensor
$Re = \frac{ul}{\nu}$	: Reynoldszahl
$Re_L = \frac{k^2}{\epsilon \nu}$	: turbulente Reynoldszahl
$s$	: spezifische Entropie
$s_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$	: Verformungstensor
$S$	: totale Entropie
$S$	: Kugeloberfläche im Wellenzahlenraum
$Sc = \frac{\nu}{\Gamma}$	: Schmidt Zahl
$t$	: Zeit
$t_e = \frac{4}{3\pi} \frac{k}{\epsilon}$	: Eddy turnover Zeit (bei hohen Re)
$t_M$	: Zeitmass der Vermischung
$t_{mix}$	: Mischzeit
$t_\Phi = \frac{2\langle \Phi' \rangle}{\epsilon_\Phi}$	: Mikromischzeit
$t_R$	: Zeitmass der Reaktion
$t_{st}$	: Spektrales Zeitmass
$T$	: Temperatur
$\hat{T}$	: Fourier Koeffizient Transferrate der TKE im Spektralraum
$T_\Phi$	: Transferrate der skalaren Energie im Spektralraum
$u_i$	: Kartesische Geschwindigkeitskomponente in $x_i$ -Richtung
$u_\tau$	: Schubspannungsgeschwindigkeit
$u_i$	: Kartesische Geschwindigkeitskomponente in $x_1$ -Richtung
	: auf dem Feingitter in der Zelle $i$
$U_i$	: Kartesische Geschwindigkeitskomponente in $x_1$ -Richtung
	: auf dem Grobgitter in der Zelle $i$
$\vec{u}$	: Geschwindigkeitsvektor

$\vec{u}$	: Fourier Koeffizientenvektor der Geschwindigkeiten
$U_0$	: Geschwindigkeit (Referenz-)
$v$	: spezifisches Volumen
$v_{\alpha i}$	: Stöchiometrischer Koeffizient von Spezies $\alpha$ in Reaktion $i$
$V$	: Volumen
$x_i$	: Koordinatenrichtung
$\vec{x}$	: Koordinatenvektor

## Griechische Symbole

$\alpha$	: Spezies Indizierung
$\alpha_i$	: Koeffizienten der diskreten Filteroperation
$\alpha_{n,m}$	: Koeffizient des forward Scatters von Wellenzahlband $n$ nach $m$
$\beta$	: Spezies Indizierung
$\beta_{m,n}$	: Koeffizient des backward Scatters von Wellenzahlband $m$ nach $n$
$\delta[\Psi - \Phi]$	: Delta Funktion
$\Gamma_\alpha$	: Diffusivität der Spezies $\alpha$
$\gamma_i$	: Verteilungsfaktor der Produktion auf das jeweilige Wellenzahlenband
$\delta_{ij}$	: Kronecker Delta
$\epsilon = 2\nu \langle s'_{ij} s'_{ij} \rangle$	: Dissipation der turbulenten kinetischen Energie
$\epsilon_\Phi = 2\Gamma \left\langle \frac{\partial \Phi'}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi'}{\partial x_i} \right\rangle$	: Dissipation der skalaren Varianz
$\epsilon_\Phi = 2\Gamma \frac{\partial \Phi'}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi'}{\partial x_i}$	: Subfilterdissipation der skalaren Varianz
$\eta_K$	: Kolmogorov Längenmass
$\eta_B$	: Batchelor Längenmass
$\kappa_\Phi$	: Koeffizient des logarithmischen Wandgesetzes
$\lambda$	: mittlere freie Weglänge
$\lambda$	: Wärmeleitfähigkeit
$\lambda$	: Taylorsches Mikromass der Geschwindigkeitsfelder
$\lambda_g$	: Taylorsches Mikromass des Skalarfeldes
$\mu$	: dynamische Viskosität
$\nu = \frac{\mu}{\rho}$	: kinematische Viskosität
$\xi$	: Parameter für die Dicke der diffusiven Unterschicht
$\rho$	: Dichte
$\varrho[\Psi, \Phi]$	: fine grained Dichte des Skalars
$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}$	: Spannungstensor
$\tau_{ij} = 2\mu \left( s_{ij} - \frac{1}{3} s_{kk} \delta_{ij} \right)$	: nicht isotroper Anteil des Verformungstensors
$\tau_\Phi = - \int_0^k T_\Phi(s, t) ds$	: spektrale skalare Energie Transferrate
$\Phi_\alpha$	: Konzentration der Spezies $\alpha$
$\Phi_\tau$	: Schubspannungskonzentration
$\Psi_{ij}$	: Geschwindigkeitsspektrumtensor

$\Psi_\Phi$	: Spektrumstensor des Skalars
$\Psi$	: Zustandsraumvariable des Skalars
$\omega_\alpha$	: Reaktionsrate bzw. Quell oder Senkenterm der Spezies $\alpha$
$\omega_i$	: Wirbelstärke
$\Omega_M$	: Mischfrequenz

# 1 Einleitung

Kommt man als Student zum ersten Mal mit der Strömungsmechanik in Kontakt, wird einem ein System von Differentialgleichungen an die Tafel geschrieben, das am Anfang schwer verständlich ist. Dies wird dann soweit reduziert und vereinfacht bis z.B. die Bernoulli Gleichung übrig bleibt und man erkennt, warum die Ohren am Grund des Schwimmerbeckens schmerzen. Wenn man dann noch berechnen kann, wie weit ein Wasserstrahl aus einem Rohr unter Druck heraus spritzen kann, hat man das Vordiplom wahrscheinlich schon in der Tasche. Meist wird die Auseinandersetzung mit der Strömungsmechanik dann beendet. Dies wird dem Themengebiet, das sich mit dem mechanischen Verhalten von Fluiden beschäftigt, bei weitem nicht gerecht, denn die Relevanz der Strömungsmechanik in Natur und Technik ist enorm. Angefangen von Wind und Wetter, über Aerodynamik von Flugzeugen, Akustik in Kinosälen, Blutkreislauf, Trinkwasserversorgung, Wärmetauscher, Turbinen, etc. bis hin zu dem Verhalten eines Staus auf der Autobahn - all das kann mit den Prinzipien der Strömungsmechanik beschrieben werden. Dies ist wiederum kein Wunder, wenn man bedenkt wie "allgemein" die Definition eines Fluids formuliert ist und führt auch natürlich zu folgendem Problem: Die Strömungsmechanik ist ein sehr komplexer Forschungsbereich. Beschränkt man sich in der Strömungsmechanik auf Newton'sche Fluide, also Flüssigkeiten oder Gase mit linearem Zusammenhang zwischen Schubspannung und Geschwindigkeitsgradient, so sind die beschreibenden Differentialgleichungen schon seit dem 19. Jahrhundert bekannt. Obwohl diese Differentialgleichungen einen deterministischen Zusammenhang zwischen den einzelnen Strömungsgrößen beschreiben, stellt deren Lösung ein sehr aufwendiges Unterfangen dar.

Können gewisse Probleme, wie z.B. laminare Strömungen, noch analytisch und Strömungen bei niedrigen Reynolds Zahlen noch effizient und exakt durch numerische Verfahren gelöst werden, so ist dies bei industriell relevanten Strömungen bzw. bei Strömungen mit hohen Reynolds Zahlen nicht mehr der Fall. Die Ursache für diese Komplexität liegt in dem nicht linearen Term und der dadurch erzeugten großen Anzahl an verschiedenen Skalen. Da alle auftauchenden Skalen, von dem kleinsten Wirbel bis hin zu den großen energietragenden Strukturen von Bedeutung sein können, erweist sich die Lösung von diesen Strömungen als sehr aufwendig und im allgemeinen als nicht mehr Analytisch möglich. In diesem Zusammenhang hat man es dann meist mit einer turbulenten Strömung mit einer Vielzahl an Längen- und Zeitskalen zu tun und die Numerische Simulation bleibt oft als einzige Möglichkeit um Voraussagen über die Eigenschaften der Strömung zu treffen. Da man dann durch die Begrenzung der Ressourcen, wie z.B. Speicherplatz und Rechenzeit, gezwungen ist, nicht alle Skalen exakt abzubilden, muss man die Auswirkung der nicht mehr abgebildeten Skalen auf die noch abgebildeten durch Modelle beschreiben. Am ältesten ist dabei das Konzept der Reynolds-gemittelten Gleichungen, welches darauf beruht, die Navier-Stokes

Gleichungen für die Ensemble gemittelten Geschwindigkeiten  $\langle u_i \rangle$  zu lösen und die Auswirkungen der Geschwindigkeitsschwankungen  $\langle u'_i u'_j \rangle$  auf die mittleren Geschwindigkeiten durch Modelle zu beschreiben. Diese so genannten RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) Methoden, für die viel Forschungsaufwand betrieben wurde, sind weit verbreitet und werden mittlerweile auch standardmäßig in kommerziellen Strömungslösern eingesetzt. Der Modellierungsaufwand, der dabei betrieben wird, reicht von einfachen Zweigleichungsmodellen in Paarung mit dem Wirbelviskositätsansatz bis hin zur Lösung der Transportgleichungen der Reynoldsspannungen selbst.

Durch die Entwicklung leistungsfähiger Rechner wurde es, alternativ zur RANS, möglich, die Navier-Stokes Gleichungen nach den gefilterten Geschwindigkeiten  $\bar{u}_i$  zu lösen und nur die Feinstrukturspannungen  $\overline{u'_i u'_j}$  zu modellieren. Diese so genannte Grobstruktursimulation (*Large Eddy Simulation*) löst also die großen Strukturen noch auf und reduziert den Modellierungsaufwand auf die Skalen jenseits der Filterweite. Dadurch erhält man genauere Informationen über die Struktur und Intensitäten der großen instationären Schwankungsbewegungen, die bei manchen Fragestellungen von großer Bedeutung sind und von RANS Methoden unzureichend wiedergegeben werden. Der kommerzielle Einsatz von LES ist durch den großen Ressourcenbedarf noch nicht sehr verbreitet und an gewissen Fragestellungen der Modellierung, z.B. Wandmodellierung, Transition oder Ablöseprozessen wird noch intensiv geforscht. Die Direkte Numerische Simulation (DNS), die versucht, alle vorkommenden Skalen zu beschreiben, ist aufgrund der immensen Anforderungen noch akademischer Natur und wird in absehbarer Zeit auch auf niedrige Reynolds Zahlen beschränkt bleiben. Trotzdem ist die DNS für die Entwicklung von Modellen und Untersuchung von Strömungen unverzichtbar, da mit ihrer Hilfe Information über alle Größen zu jedem simulierten Zeitpunkt verfügbar sind, die unter Umständen experimentell sehr schwer zugänglich sind.

Ist es schon aufwendig genug Antworten auf strömungsmechanische Fragestellungen zu finden, kommen in vielen Anwendungen aus Natur und Technik noch weitere Fragen hinzu. So ist bei Verbrennungskraftmaschinen nicht nur die Strömung in Verdichter, Brennkammer und Turbine wichtig, sondern es ist auch die Verteilung und Vermischung der Brennstoffe, die Flammstabilität, die Temperatur etc. von Bedeutung. Bei der Umströmung von Kraftfahrzeugen ist es nicht nur der Luftwiderstand, sondern z. B. auch die Lärmentwicklung und bei der Auslegung von Belüftungssystemen auch die Ausbreitung von Rauch oder anderen Schwebstoffen. Die Anzahl dieser Fragestellungen ist immens, vor allem wenn man davon ausgeht, dass die Strömung, bzw. die turbulente Strömung ja genau wegen dieser "Dienstleistungen" eingesetzt wird, nämlich um Energie, Stoffe oder Substanzen zu transportieren, zu vermischen, zueinander zubringen oder abzuführen.

Die Analyse und Modellierung eines dieser Probleme, und zwar die turbulente Vermischung von Stoffen mit dem Zwecke einer Fällungsreaktion zwischen diesen, ist die Motivation für diese Doktorarbeit. Viele Prozesse in der chemischen Verfahrenstechnik finden in wässrigen Lösungen statt, wobei die Flüssigkeit der Träger der Edukte und Produkte ist. Die chemische Fällungsreaktion zwischen den Edukten findet auf den molekularen Skalen statt, kann also nur ablaufen, wenn auf molekularer Ebene alle zur Reaktion benötigten Edukte in Kontakt sind. Die auf der molekularen Ebene vorhandene Übersättigung wird dann mit der Zeitskala der chemischen Reaktion  $t_R$  abgebaut. Die Aufgabe der Vermischung ist es, die Edukte im

Trägerfluid auf molekularer Ebene zueinander zu bringen und so Übersättigung aufzubauen. Dies geschieht letztendlich immer zuerst mechanisch, also über die turbulente Strömung selbst, und am Ende auf den kleinsten Skalen durch die molekulare Diffusion und kann in diversen Mischapparaturen wie z. B. Rührmischer, Strahlmischer oder T-Mischer erreicht werden. Die Zeit mit der die Übersättigung aufgebaut wird, bezeichnet man als Mischzeit  $t_M$  [2]. Ist die Reaktionszeit  $t_R$  kleiner als die Mischzeit  $t_M$ , so wird die Reaktionskinetik und alle darauf folgenden Prozesse maßgeblich von der Intensität und Geschwindigkeit der Vermischung beeinflusst. Um derartige aufeinander aufbauende Prozesse, turbulente Vermischung und chemische Reaktion, vorhersagen bzw. simulieren zu können, müssen die Methoden der Strömungsmechanik also in der Lage sein, den Aufbau der Übersättigung auf den molekularen Skalen zu beschreiben. Die Bestimmung der Übersättigung bei der turbulenten Vermischung in wässrigen Lösungen ist aus strömungsmechanischer Sicht gerade deswegen problematisch, da die molekulare Diffusion sehr gering ist (dies entspricht einer hohen Schmidt Zahl) und daher der Übersättigungsaufbau bei Skalen stattfindet, die deutlich kleiner sind als die kleinsten Strukturen im Strömungsfeld. Dies hat zur Folge, dass eine direkte Simulation der Vermischung bis zu den kleinsten Skalen (also eine DNS des Skalarfeldes) bei den in wässrigen Lösungen üblicherweise herrschenden Schmidt Zahlen von  $\approx 1000$  in absehbarer Zukunft nicht möglich sein wird und man zur Modellierung gezwungen ist. Dadurch, dass die Übersättigung sowie die dadurch getriebenen chemischen Prozesse stark nicht linear sind [31] machen sich hier allerdings Modellierungsfehler besonders schnell bemerkbar.

Die vorliegende Arbeit entwickelt und untersucht daher ein Verfahren um das turbulente und molekulare Vermischen (und damit den Übersättigungsaufbau) bei hohen Schmidt Zahlen im Detail vorherzusagen. Der dazu in dieser Arbeit verfolgte neuartige Ansatz besteht aus der Kopplung einer DNS des Strömungsfeldes mit einer gefilterten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion-Simulation (*filtered density function*, FDF) für die Beschreibung des Skalarfeldes. Die FDF Methode ist eine Erweiterung der PDF Methode (*probability density function*) und beruht auf einer stochastischen Beschreibung des Skalarfeldes. Grundlegende Arbeiten zu den PDF Methoden wurden von Pope [49,50,52] und O'Brian [46] durchgeführt. Die PDF Methoden lösen dabei die Transportgleichungen für die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Skalare in Raum und Zeit und besitzen den großen Vorteil, dass in diesen Gleichungen der nicht-lineare Reaktionsterm bzw. der Term, der die Übersättigung beschreibt, geschlossen vorliegt. Mit anderen Worten: Kennt man die PDF aller Skalare an einem Ort und Zeitpunkt, kann man auch die Übersättigung bzw. die Reaktionsrate geschlossen berechnen. Die PDF Methoden wurden sehr erfolgreich in den RANS Modellierungen verwendet. Eine Erweiterung stellt die so genannte LES-FDF Methode dar, in der die Transportgleichung für die FDF mit einer LES des Strömungsfeldes gekoppelt wird. Da die LES große Strukturen räumlich und zeitlich auflöst, stellt die FDF die lokale und instantane PDF der Feinstrukturfluktuationen der Skalare dar. Der Erwartungswert der FDF entspricht dabei dem gefilterten Skalarfeld. Diese Methode wurde als erstes von Givi [20] vorgeschlagen und Colucci et al. [8] zeigten mit dieser Methode viel versprechende Ergebnisse. In dieser Arbeit soll die Grundlage für die neuartige Kopplung der FDF Transportgleichung mit einer DNS des Strömungsfeldes im Hinblick auf hohe Schmidt Zahlen entwickelt werden. Dabei entstehen im Vergleich zu den LES-FDF Methoden mehrere Besonderheiten: (i) Durch die Kopplung mit einer DNS des Strömungsfeldes ist der konvektive Term in den FDF Trans-

portgleichungen geschlossen und muss nicht modelliert werden. (ii) Die bisherigen LES-FDF Methoden [8, 55] wurden für Strömungen bei  $Sc = 0.7 - 1.0$  angewandt und (iii) die Modellierung des Mikromischterms wurde mit der Feinstrukturspannung und der Filterweite des LES Modells verknüpft. Kann man wegen Punkt (i) einfach genauere Ergebnisse erwarten, so muss eine Modellierung des Mikromischens wegen Punkt (ii) und Punkt (iii) gerade auch im Hinblick auf hohe  $Sc$  Zahlen und mit der Verknüpfung mit einer DNS neu entwickelt und untersucht werden.

Daher wird in dieser Arbeit wie folgt vorgegangen. In Kapitel 2 werden die Erhaltungsgleichungen für Masse und Impuls sowie die Skalartransportgleichung eingeführt. Diese Gleichungen stellen die Grundlage für jede numerische Simulation von strömungsmechanischen Mischprozessen dar. Im Anschluss daran wird anhand des Spektralraums die turbulente Wirbelkaskade erklärt. Dies soll verdeutlichen, dass bei turbulenten Strömungen eine große Zahl an Skalen vorhanden ist und dass bei hohen  $Sc$  die Strukturen im Skalarfeld deutlich kleiner als im Strömungsfeld sind. Außerdem werden die Abschätzungen für die Größe der kleinsten Strukturen und das Verhältnis dieser zueinander gegeben. Die Betrachtung der Wirbelkaskade im Spektralraum wird auch in Kapitel 3 benützt um den Prozess des Vermischens, also das Reduzieren des skalaren Längenmaßes von den integralen Skalen zu den molekularen Skalen, zu erklären. Es wird verdeutlicht, dass das Vermischen dem Abbau von skalarer Varianz durch die Dissipation von skalarer Varianz entspricht und durch diese beiden Größen ein Zeitmaß für die Vermischung definiert ist. Da diese beiden Größen die Vermischung charakterisieren, ist die Vorhersage gerade der skalaren Dissipationsrate für die Simulation von Mischprozessen extrem wichtig und deswegen werden am Ende des Kapitels zwei Modelle für die Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate aus der Literatur vorgestellt. Diese Modellgleichungen dienen als Ausgangspunkt für die spätere Modellierung der subfilter Dissipationsrate in Kapitel 7. Für die Untersuchung und Modellentwicklung der DNS-FDF Methode werden Daten turbulenter Vermischung bei hohen  $Sc$  benötigt. Dazu wurden DNS von turbulenter Kanalströmung bei  $Re_\tau = 180$  und  $Sc = 3$  bis  $Sc = 49$  durchgeführt. Der dafür benutzte Strömungslöser MGLET und die dafür entwickelten besonderen Methoden werden in Kapitel 4 vorgestellt. Kapitel 5 zeigt dann die Ergebnisse dieser Simulationen selbst. Die DNS-FDF Methode wird in Kapitel 6 eingeführt. Dabei muss beachtet werden, dass die Strömungssimulation einer normalen DNS entspricht und die Besonderheit der DNS-FDF Methode darin besteht, dass nicht die Skalartransportgleichung im Euler-Rahmen gelöst wird, sondern das Skalarfeld durch die gefilterte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion beschrieben wird. Kapitel 6 beschreibt daher die Grundlagen und die Herleitung der FDF Transportgleichung wenn diese mit einer DNS des Strömungsfeldes gekoppelt wird, zeigt welcher Term modelliert werden muss und erklärt die Monte-Carlo Methode, mit der die FDF Transportgleichung gelöst werden kann. In Kapitel 7 wird nun in zwei Schritten ein Modell für den Mikromischterm erarbeitet: Zuerst wird der "linear mean square estimation" (LMSE) Ansatz a priori mit den DNS Daten aus Kapitel 5 untersucht und analysiert. In einem zweiten Schritt wird ein Modell für die in der Mischfrequenz des LMSE Ansatzes vorkommende, subfilter Dissipationsrate entwickelt. Dafür wird zuerst die Transportgleichung der subfilter Dissipationsrate aus den DNS Daten aus Kapitel 5 Term für Term ausgewertet und modelliert. Für die Modellterme wird auf die in Kapitel 3 eingeführten Modelle zurückgegriffen und die Modellkonstanten werden a priori an die DNS Daten angepasst. Abschließend wird die Qualität des entwickelten Modells der Transportgleichung a posteriori, mit Hilfe der DNS Daten der turbulenten



Vermischung im Kanal, instantan entlang von Lagrange Bahnen sowie im statistischen Mittel gezeigt. Kapitel 8 fasst die wichtigsten Ergebnisse nochmals zusammen und gibt einen Ausblick auf den weiteren Forschungsbedarf.

### Schwerpunktprogramm 1141

Diese Arbeit war in dem von der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Schwerpunktprogramm 1141 finanziell geförderten Projekt "Direkte, Large-Eddy- und Filtered-Density-Funktion-Simulation des Mikromischens" eingebettet. Das Thema dieses Projektes war die Entwicklung eines numerischen Gesamtverfahrens zur Vorhersage der Partikelgrößenverteilung (PGV) einer Fällungsreaktion bei der turbulenten Vermischung in einem T-Mischer in Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für Grenzflächenverfahrenstechnik (LFG) in Erlangen unter der Leitung von Prof. Peukert. Die Fällungsreaktion mit Partikelkinetik ist selbst ein sehr komplexes Thema, da eine Vielzahl an Prozessen wie Keimbildung, Wachstum, Agglomeration und Aggregation mitwirken [61]. Die Kopplung mit der Strömung findet aber immer über den Aufbau der Übersättigung statt, da viele dieser Prozesse, allen voran Keimbildung und Wachstum, stark nicht linear von dieser abhängen. Die vorliegende Promotionschrift fasst die Forschungsarbeiten der strömungsmechanischen Seite dieses Gesamtverfahrens, also die Beschreibung des Übersättigungsaufbau, zusammen. Darüber hinaus wurde in Zusammenarbeit mit dem LFG auch die Vermischung in einem T-Mischer untersucht und ein zwei stufiges Verfahren zur Berechnung der PGV entwickelt. Diese Arbeiten werden im Folgenden kurz zusammengefasst.

Die untersuchten T-Mischer sind Strömungsmischer, die die Edukte durch zwei gegenüberliegenden runde Zuströmröhre in einer T-förmigen Verbindung einander kontinuierlich zuführen. Die beiden Strahlen prallen aufeinander, erzeugen dabei hohe Turbulenzintensitäten und die Strömung verlässt den T-Mischer wieder, nun voll vermischt, in einem rechteckigen Hauptkanal. Die Strömung wurde numerisch und experimentell untersucht [62] und es wurde ein numerisches Verfahren zur Vorhersage der PGV entwickelt [21, 59, 61]. Dieses Verfahren beruht auf einer DNS der Strömung mit der Verfolgung von einer begrenzten Anzahl von Lagrange Bahnen und der Aufzeichnung der turbulenten kinetischen Energie (TKE), der Dissipation der TKE und der simulierten Hintergrundkonzentration bei  $Sc = 1$  entlang dieser Bahnen. Diese Daten dienen als Randbedingung für die Lösung der Differentialgleichung der Populationsbilanz entlang der Bahn, welche dann zusammengefasst über alle Bahnen eine PGV für den jeweiligen T-Mischer bei der jeweiligen Reynolds Zahl ergaben. Der Übersättigungsaufbau wurde mit dem "modified Engulfment" Modell nach Schwarzer [61] und Baldyga und Bourne [2] bestimmt. Diese Vorgehensweise konnte gute Vorhersagen der PGV erzielen, benötigt aber zwei sukzessive, voneinander entkoppelte Simulationsschritte, die Simulation der Strömung mit den Lagrange Bahnen und die Simulation der Partikelkinetik. Dementsprechend hat die Partikelkinetik keine Rückwirkung auf das Konzentrationsfeld in der Strömungssimulation. Die Ergebnisse dieser Forschungsarbeiten sind anderweitig veröffentlicht [21, 59, 61, 62], ihre Darstellung würde den Rahmen dieser Arbeit übersteigen.

Für eine echte Kopplung der Partikelkinetik mit der Strömungsmechanik muss während der Strömungsberechnung die Übersättigung auf molekularer Ebene bestimmt und die Po-

pulationsbilanz gelöst werden. Die in dieser Dissertation vorgestellte Mischmodellierung liefert die Übersättigung in geschlossener Form und, unter Verwendung der Monte-Carlo-Methode, auf einer großen Anzahl stochastischer Partikel. Auf diesen stochastischen Partikeln kann die Populationsbilanz mit der Momenten-Methode gelöst werden [61]. Auf diese Art und Weise erhält man einen kombinierten Ansatz aus DNS-FDF und Momenten-Methode für die gekoppelte und voll integrierte Vorhersage von PGV in einem Strömungslöser.

# 2 Grundlagen der Strömungsmechanik und des Stofftransports

In diesem Kapitel werden die inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen und die Transportgleichung eines passiven Skalars eingeführt. Diese Gleichungen beschreiben den Prozess des turbulenten Vermischens vollständig und müssen für die Bestimmung der Übersättigung auf molekularer Ebene gelöst werden. Es werden die Eigenschaften von turbulenten Strömungen erläutert, die Form und Skalen der Energie- und Skalarspektren und damit im Hinblick auf die Vermischung bei hohen Schmidt Zahlen die Schwierigkeiten bei der Lösung der Gleichungen verdeutlicht.

Eine grundlegende Definition einfacher Fluide findet man in Batchelor [4]. Diese besagt dass Fluide einer Kraft, die das Fluid verformt ohne das Volumen zu ändern, einen Widerstand entgegensetzen können, der aber die Verformung nicht aufhalten kann. In anderen Worten wird sich ein Fluid unter der Einwirkung äußerer Kräfte verformen, auch wenn diese Kräfte verschwindend gering sind. Im Allgemeinen bestehen Fluide aus diskret verteilten Molekülen mit sehr kleinen Längen- und Zeitskalen (z.B. deren Geschwindigkeit und deren mittlere freie Weglänge  $\lambda$ ). Im Gegensatz dazu besagt die *Kontinuumshypothese* dass die makroskopischen Eigenschaften des Fluids kontinuierlich im Raum verteilt sind. Daraus ergibt sich eine Definition der kontinuumsmechanische Eigenschaften des Fluids: sie bestehen aus der Mittelung der molekularen Eigenschaften über ein Volumen das groß gegenüber den molekularen Skalen und klein gegenüber der kleinsten geometrische Skalen  $l$  ist. Dieser Zusammenhang wird über die Knudsen Zahl quantifiziert:

$$Kn = \frac{\lambda}{l}. \tag{2.1}$$

Der allgemeine kontinuumsmechanische Ansatz für Strömungen ist für  $Kn \ll 1$  gerechtfertigt. Für die Beschreibung einphasiger Fluide im thermodynamischen Gleichgewicht genügen fünf Variablen, bestehend aus zwei thermodynamische Zustandsvariablen und drei Geschwindigkeitskomponenten für die Bewegung im dreidimensionalen Raum.

## 2.1 Grundgleichungen der Strömungsmechanik

Die Erhaltungsgleichungen beschreiben das räumliche und zeitliche Verhalten der Variablen und damit der Strömung und werden im folgenden Abschnitt dargelegt.

## Erhaltungsgleichungen

Wählt man in einem kartesischen Koordinatensystem als thermodynamische Variablen die Dichte  $\rho(\vec{x}, t)$  und die totale spezifische Energie  $E(\vec{x}, t)$  mitsamt den kartesischen Komponenten des Geschwindigkeitsvektors  $u_i(\vec{x}, t)$ , so lauten die Erhaltungsgleichungen in differentieller Form für die Masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (2.2)$$

den Impuls

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_j} = \rho f_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}, \quad (2.3)$$

sowie für die totale spezifische Energie  $E = e + \frac{1}{2}u_i^2$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_j E = \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i - q_j) + \rho f_i u_i. \quad (2.4)$$

Dabei ist  $f_i$  eine Volumenkraft,  $\sigma_{ij}$  der Spannungstensor,  $e$  die spezifische, innere Energie und  $q_i$  die Wärmeleitung. Die Herleitung dieser Gleichungen erfolgt über die Betrachtung eines infinitesimalen Volumens. Dessen Masse kann sich durch Zu- und Abfluss über die Oberfläche verändern. Dessen Impuls kann sich durch Zu- und Abfluss, durch an der Oberfläche angreifende Spannungen und durch wirkende Volumenkräfte (z.B. Schwerkraft) verändern. Die Energie des infinitesimalen Volumens wiederum kann sich durch Zu- und Abfluss, durch am Volumen verrichtete Arbeit oder durch die Wärmeleitung verändern.

Bei thermisch und kalorisch idealen Gasen sind die thermodynamischen Zustandsgrößen durch das ideale Gasgesetz

$$p = \rho R T, \quad (2.5)$$

die innere Energie  $e$  mit der Temperatur  $T$

$$e = c_v T, \quad (2.6)$$

und die spezifische Entropie  $s$  mit den anderen thermodynamischen Größen über die Gibbs'sche Fundamentalgleichung verknüpft:

$$dh = c_p dT = T ds + \frac{dp}{\rho} . \quad (2.7)$$

Dabei ist  $R = c_p - c_v$  die allgemeine Gaskonstante,  $c_p$  und  $c_v$  die spezifischen Wärmekapazitäten bei konstantem Druck und konstantem Volumen, sowie  $h$  die spezifische Enthalpie. Eine spezifische Größe bezeichnet hierbei eine mit der Dichte normierte Größe.

Mit den Zustandsgleichungen (2.5) mit (2.7) lassen sich die Erhaltungsgleichungen (2.2) mit (2.4) umformen. So kann man zum Beispiel Erhaltungsgleichungen für den Druck und die Temperatur oder für den Druck und die Entropie aufstellen. Setzt man in diese Erhaltungsgleichungen die Materialgesetze für den Spannungstensor von Newton'schen Fluiden ein, erhält man die Navier-Stokes Gleichungen.

## Navier-Stokes Gleichungen

Der in Gleichung (2.3) und (2.4) auftretenden Spannungstensor  $\sigma_{ij}$  besteht aus zwei Anteilen. Zum einen aus einem isotropen Anteil  $p$ , der bei ruhender Flüssigkeit in den statischen Druck übergeht, und dem nicht isotropen viskosen Spannungstensor  $\tau_{ij}$ , der aus der Verformung des Fluids entsteht:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} . \quad (2.8)$$

Für Newton'sche Flüssigkeiten ist der viskose Spannungstensor linear abhängig von den Verformungen:

$$\tau_{ij} = 2\mu \left( s_{ij} - \frac{1}{3} s_{kk} \delta_{ij} \right) + \mu_D s_{kk} \delta_{ij} , \quad (2.9)$$

$$\text{mit } s_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) . \quad (2.10)$$

Dabei ist die dynamische Viskosität  $\mu$  der Proportionalitätsfaktor für die anisotropen Verformungen,  $\mu_D$  die Druckzähigkeit und  $\delta_{ij}$  bezeichnet das Kroneckersymbol. Die Druckzähigkeit

ist für einatomige Gase exakt Null und berücksichtigt Effekte durch innere Freiheitsgrade [17]. In den meisten strömungsmechanischen Problemen wird diese zu Null gesetzt, so dass der viskose Spannungstensor sich zu

$$\tau_{ij} = 2\mu \left( s_{ij} - \frac{1}{3} s_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (2.11)$$

ergibt. Dieser Zusammenhang wurde von Navier (1822) und Stokes (1845) auf unterschiedliche Weise hergeleitet. Wird dieser Ansatz für die Spannungen in die Erhaltungsgleichungen eingesetzt, so werden aus diesen die Navier-Stokes Gleichungen.

## Inkompressible Navier-Stokes Gleichungen

Die Navier-Stokes Gleichungen können bei geringer Machzahl, geringen Dichteunterschiede und falls akustische Effekte nicht relevant sind zu den inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen vereinfacht werden. Diese Vereinfachung ist bei vielen Strömungsfällen anwendbar und auch in dem hier untersuchten Problem der turbulenten Vermischung in wässrigen Lösungen der Fall und wird im nachfolgenden näher erläutert.

Inkompressibel bedeutet, dass die Dichteänderungen eines kleinen materiellen Elementes verschwindend gering sind. Schreibt man die Massenerhaltungsgleichung um zu

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.12)$$

und setzt die Dichteänderungen zu Null, ergibt sich die Bedingung der Divergenzfreiheit bei inkompressiblen Strömungen. Charakterisiert man die räumliche Verteilung in einer Strömung mit einem Längenmaß  $L_0$  und einem Geschwindigkeitsmaß  $U_0$ , so charakterisieren diese Skalen den Geschwindigkeitsgradienten. Die Divergenzfreiheit ist also gerechtfertigt falls

$$\left| \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right| \ll \frac{U_0}{L_0} \quad (2.13)$$

und dementsprechend muss auch

$$\left| \frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} \right| \ll \frac{U_0}{L_0} \quad (2.14)$$

gelten. Die substantielle Ableitung der Dichte kann mit Hilfe der totalen Differentiation der idealen Gasgleichung (2.5) und mit der Gibbs'schen Fundamentalgleichung (2.7) umgeformt werden zu:

$$\left| \frac{1}{\rho c^2} \frac{Dp}{Dt} - \frac{1}{\rho c^2} \left( \frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho \frac{DS}{Dt} \right| \ll \frac{U_0}{L_0}. \quad (2.15)$$

Dabei ist  $c$  die Schallgeschwindigkeit. Diese Bedingung ist dann erfüllt wenn beide Terme für sich betrachtet deutlich kleiner als  $U_0/L_0$  sind. Bei genauerer Betrachtung des ersten Terms auf der linken Seite von (2.15) lassen sich durch weitere Umformungen folgende Kriterien ableiten:

- Das Quadrat der Machzahl muss deutlich kleiner eins sein:

$$\frac{U_0^2}{c^2} \ll 1. \quad (2.16)$$

- Sei  $f$  die Frequenz von Druckschwankungen, so muss gelten:

$$\frac{f^2 L_0^2}{c^2} \ll 1. \quad (2.17)$$

Ist  $f$  in der Größenordnung von  $U_0/L_0$ , dann geht Bedingung (2.17) in Bedingung (2.16) über. Wenn  $L_0$  in der Größenordnung von akustischen Wellen ist, dann wird  $fL_0/c$  gleich eins. Daher kann bei Betrachtung von akustischen Wellen die Kompressibilität nicht vernachlässigt werden.

- Sei  $g$  die Schwerkraft, so muss gelten:

$$\frac{gL_0}{c^2} \ll 1. \quad (2.18)$$

Werden diese drei Bedingungen erfüllt, dann verhält sich das Fluid quasi inkompressibel. Das bedeutet dass die Veränderungen der Dichte in einem kleinen materiellen Element aufgrund von Druckgradienten verschwindend gering ist. Der Einfluss des zweiten Terms der linken Seite von (2.15) ist nur dann nicht vernachlässigbar, wenn  $L_0$  sehr klein und  $U_0$  sehr groß ist und wenn große Temperaturunterschiede herrschen. Speziell bei der Betrachtung von Wasser ist es sehr selten dass die durch Dissipation entstehende innere Energie durch Temperaturveränderungen einen Einfluss auf die Strömung ausübt. Betrachtet man Strömungen denen keine äußeren Temperaturgradienten auferlegt sind und die keine inneren Energiequellen haben, wie z. B. Verbrennung, so kann man aufgrund des verschwindend geringen Einflusses der Dissipation auf die Temperatur (bzw. Energieverteilung) die Strömung als

isotherm betrachten. Dementsprechend benötigt man dann die Energieerhaltungsgleichung nicht mehr um das System zu beschreiben. Sind also alle Inkompressibilitätsbedingungen erfüllt und die Strömung isotherm, so vereinfachen sich die Navier-Stokes Gleichungen zu den inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \nu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) + f_i. \quad (2.20)$$

Dabei ist  $\nu$  die kinematische Viskosität. Diese vier Gleichungen, nämlich die Massenerhaltung sowie die drei Impulserhaltungsgleichungen stellen das Gleichungssystem dar, das inkompressible Strömungen vollständig beschreibt. Dieses Gleichungssystem wird im Strömungslöser MGLET diskretisiert und gelöst. Um zusätzlich zur Strömung Information über die Verteilung eines Stoffes bzw. passiven Skalars zu erhalten und damit die Vermischung charakterisieren zu können muss auch eine Erhaltungsgleichung für einen passiven Skalar aufgestellt und gelöst werden.

## 2.2 Grundgleichung des Stofftransports

In diesem Abschnitt wird die Transportgleichung eines passiven Skalars eingeführt und die Nichtlinearität des Quell- bzw. Senkenterms durch das Beispiel einer einfachen chemischen Reaktion erläutert. Diese Nichtlinearität führt zu Schwierigkeiten bei der Modellierung.

### Erhaltungsgleichung

Der Transport von in Flüssigkeiten und Gasen gelösten Stoffen wird durch die Konvektions-Diffusions Gleichung einer skalaren Größe  $\Phi_\alpha(\vec{x}, t)$  beschrieben. Bei gelösten Stoffen entspricht  $\Phi_\alpha$  der Konzentration in mol/l, also der Stoffmenge der Spezies  $\alpha$  pro Volumen. Die Diffusion wird durch Fick's Gesetze beschrieben. Mit dem Diffusionskoeffizienten  $\Gamma_\alpha$  und einem Senken- bzw. Quellterm  $\omega_\alpha$  lautet diese Erhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial \rho \Phi_\alpha}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho \Phi_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \rho \Gamma_\alpha \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_j} + \omega_\alpha. \quad (2.21)$$



Diese Gleichung kann anhand der Betrachtung eines finiten Volumens des Fluids hergeleitet werden. Demnach ändert sich die Konzentration im betrachteten Volumen durch konvektiven Fluss über die Oberfläche des Volumens (zweiter Term auf der linken Seite), diffusiven Fluss über die Oberfläche des Volumens (erster Term auf der rechten Seite) und einer Quelle oder Senke im Volumen (letzter Term auf der rechten Seite). Hat die skalare Größe  $\Phi_\alpha$  keinen Einfluss auf die Strömung, also auf die Navier-Stokes Gleichungen, spricht man von einem passiven Skalar. Dies ist der Fall wenn die gelöste Stoffmenge gering genug ist, so dass keine Zweiphasenströmung entsteht und wenn der Stoff die Fluideigenschaften nicht verändert. Bei inkompressiblen Strömungen vereinfacht sich Gleichung (2.21) zu:

$$\frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial t} + u_i \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_i} = \Gamma_\alpha \frac{\partial^2 \Phi_\alpha}{\partial x_j^2} + \omega_\alpha. \quad (2.22)$$

Ein passiver Skalar kann dazu verwendet werden unterschiedliche Transportvorgänge zu beschreiben und muss nicht nur die Konzentration eines gelösten Stoffes darstellen. So kann bei einer inkompressiblen Strömung mit nur sehr geringen Temperaturgradienten Gleichung 2.22 die Temperaturverteilung beschreiben. In diesem Falle würde  $\Phi$  der Temperatur entsprechen,  $\Gamma_\alpha$  geht in die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  über und der Quellterm  $\omega_\alpha$  beschreibt z. B. Quellen durch Wärmestrahlung.

## Chemische Reaktion

Der Senken- und Quellterm  $\omega_\alpha$  berücksichtigt die Auswirkungen einer eventuell auftretenden chemischen Reaktion. In realistischen Anwendungen kann diese durch das Auftreten mehrerer Zwischenprodukte, unterschiedlicher Reaktionsraten und mehrerer beteiligter Spezies sehr komplex werden. Allgemein nimmt dieser die Form

$$\omega_\alpha = \sum_{i=1}^I \left( v_{\alpha i}^r - v_{\alpha i}^f \right) R_i(\Phi) \quad (2.23)$$

an. Dabei ist  $I$  die Anzahl der möglichen Reaktionen,  $v_{\alpha i}$  der stöchiometrische Koeffizient von Spezies  $\alpha$  in der jeweiligen Reaktionsgleichung, jeweils für die vorwärts- ( $f$ ) und rückwärts ( $r$ ) Richtung (also jeweils linke und rechte Seite der Reaktionsgleichung), und  $R_i$  die jeweilige Reaktionsgeschwindigkeit. Die Reaktionsgeschwindigkeit ergibt sich aus Reaktionsrate  $k_i(T)$  (die wieder für beide Richtungen unterschiedlich sein kann) und den

Konzentrationen der einzelnen Spezies, potenziert mit ihrem stöchiometrischen Koeffizienten:

$$R_i(\Phi) = k_i^f(T) \prod_{\beta=1}^K \Phi_{\beta}^{v_{\beta}^f} - k_i^r(T) \prod_{\beta=1}^K \Phi_{\beta}^{v_{\beta}^r} . \quad (2.24)$$

Die Reaktionsrate selbst wiederum wird über das Arrhenius Gesetz beschrieben

$$k_i^f(T) = A_i T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right) , \quad (2.25)$$

wobei  $A_i$  und  $\beta_i$  Konstanten für die  $i$ te Reaktion darstellen und  $E_i$  die Aktivierungsenergie und  $R$  die allgemeine Gaskonstante bezeichnen. Die Reaktionsrate für die vorwärts- und rückwärts Reaktion stehen über die Gleichgewichtskonstante  $K_i$  in Verbindung:

$$k_i^r(T) = \frac{k_i^f(T)}{K_i} . \quad (2.26)$$

Man beachte dass für isotherme Strömungen mit chemischen Reaktionen ohne nennenswerte Energiefreisetzung die Reaktionsgeschwindigkeiten als konstant angenommen werden können. In diesem Falle und für nur eine einfache, elementare Reaktion



mit den Edukten A ( $\alpha$ ) und B ( $\beta$ ), dem Produkt C ( $\gamma$ ) und mit  $k^r = 0$  ergibt sich daher für den Reaktionsterm

$$\omega_{\alpha} = -k^f \Phi_{\alpha} \Phi_{\beta} \quad (2.28)$$

in der Transportgleichung für Spezies  $\alpha$ . In der Transportgleichung für Spezies  $\beta$  ist der Reaktionsterm identisch, wirkt also auch als Senke, wohingegen in der Transportgleichung für das Produkt  $\gamma$  der Reaktionsterm mit anderem Vorzeichen, also als Quelle auftaucht. Sogar für diese einfachste Reaktion ist  $\omega_{\alpha}$  nicht linear und stellt dementsprechend eine Herausforderung für die Modellierung dar. Werden also in der Vorhersage der Konzentrationen  $\Phi_{\alpha}$  durch die numerische Lösung von Gleichung (2.21) Fehler gemacht oder kann bei hohen Schmidt Zahlen nur nach gefilterten Konzentrationen  $\bar{\Phi}_{\alpha}$  gelöst werden, machen sich

diese Abweichungen in der Reaktionsrate stark bemerkbar und müssen miteinbezogen werden. Der Grund warum bei hohen Schmidt Zahlen im Euler-Kontext nur nach gefilterten Konzentrationen gelöst werden kann liegt in den sehr kleinen Längenskalen die in turbulenten Strömungen im Skalarfeld bei hohen  $Sc$  auftreten. Die besonderen Eigenschaften von turbulenten Strömungen, die Charakterisierung über die Reynolds Zahl und die Zusammenhänge von Turbulenz und hoher Schmidt Zahl wird in den nächsten beiden Abschnitten erläutert.

## 2.3 Turbulenz und deren Skalen

Die inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen (2.19) mit (2.20) beschreiben einen deterministischen Zusammenhang zwischen den Strömungsvariablen und deren zeitliche Veränderung. Trotzdem beobachtet man bei ausreichend großer Reynolds Zahl einen randomen Charakter der Strömungsvariablen. Wiederholt man ein und dasselbe Experiment wird man an einem Ort  $x_i$  sehr wahrscheinlich nie einen identischen zeitlichen Verlauf einer Variable beobachten. Dieser randome Charakter ist eine Eigenschaft einer turbulenten Strömung. Weitere charakteristische Eigenschaften sind [29, 70]:

- **Unregelmäßigkeit.** Eine turbulente Strömung erscheint zufällig und chaotisch.
- **Nichtlinearität.** Durch die Nichtlinearität können kleine Störungen stark anwachsen. Werden diese nicht ausreichend durch die viskosen Kräfte gedämpft, was bei hohen Reynolds Zahlen der Fall sein kann, so entsteht dadurch eine voll turbulente Strömung.
- **Erhöhter Transport.** Durch die stark irregulären und dreidimensionalen Bewegungen werden Strömungseigenschaften und Stoffe stärker im Raum transportiert als in laminaren Strömungen, vor allem auch quer zu den gemittelten Stromlinien.
- **Drehungsbehaftet.** Turbulenz ist dreidimensional und drehungsbehaftet und diese Strukturen werden oft als Wirbel bezeichnet. In turbulenten Strömungen existieren "Wirbel" jeglicher Größenordnung, von der Abmessung der Strömung selbst bis hin zu sehr kleinen Strukturen.
- **Dissipativ.** Reibungsbehaftete Scherung verrichtet Verformungsarbeit am Fluid die kinetische Energie der Strömung in innere Energie umwandelt. Turbulente Strömungen benötigen deswegen eine Energiezufuhr um bestehen zu bleiben.

Ein Maß für die Intensität der Turbulenz bzw. das Verhältnis zwischen der kleinsten und der größten Struktur in einer Strömung liefert die Reynolds Zahl.

### Die Reynolds Zahl

Definiert man für ein Strömungsexperiment die Referenzgrößen  $U_0$ ,  $L_0$  und  $\rho$ , so können mit diesen alle dimensionsbehafteten Variablen die in den Navier-Stokes Gleichungen auftauchen

dimensionslos gemacht werden:

$$u_i^* = \frac{u_i}{U_0}, \quad x_i^* = \frac{x_i}{L_0}, \quad t^* = \frac{t}{L_0/U_0}, \quad p^* = \frac{p}{\rho U_0^2}. \quad (2.29)$$

Unter Vernachlässigung der Volumenkräfte  $f_i$  und bei konstanter kinematischer Viskosität  $\nu$  erhält man aus den Gleichungen (2.19) mit (2.20) die dimensionslosen Gleichungen:

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial x_i^*} = 0, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + u_j^* \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_j^*}{\partial x_j^2}. \quad (2.31)$$

Dabei ist die Reynolds Zahl definiert als:

$$Re = \frac{U_0 L_0}{\nu}. \quad (2.32)$$

Die Reynolds Zahl ist der einzige dimensionslose Parameter in Gleichung (2.31) und steht als Faktor vor dem viskosen Term. Sie gibt eine Aussage über die Relation zwischen den Viskosen- und den Trägheitskräften [4]. Ist die Reynolds Zahl klein bzw. in der Größenordnung um eins, sind die Zähigkeitskräfte dominierend, ist die Reynolds Zahl groß spielt die Viskosität eine geringe bis keine Rolle. Als Konsequenz wird sich dann eine turbulente Strömung ausbilden in der große, energietragende Strukturen ("Wirbel") zu kleineren Strukturen zerfallen und so Energie von den großen Skalen zu den kleinsten Skalen übertragen wird wo sie schließlich dissipiert. Dieses Konzept der Energie bzw. Wirbelkaskade wurde zuerst durch Richardson [56] formuliert, und die Reynolds Zahl gibt Aufschluss über das Verhältnis der größten zu den kleinsten Wirbel. Die Kaskade, das Energiespektrum und die Abschätzung der Kolmogorov Skalen wird im nächsten Abschnitt beleuchtet.

## Triadeninteraktion und Wirbelkaskade

Eine anschauliche Interpretation der Nichtlinearität und Wirbelkaskade ergibt sich bei der Betrachtung der Navier-Stokes Gleichungen im Fourierraum [51]. Unter der Annahme einer

homogenen isotropen Turbulenz ist die diskrete Fourierreihe der turbulenten Geschwindigkeit gegeben mit:

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k}=-\infty}^{\vec{k}=\infty} \vec{\hat{u}}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\vec{x}} . \quad (2.33)$$

Dabei ist  $\vec{k}$  der Wellenzahlvektor,  $\vec{\hat{u}}$  der Fourierkoeffizient<sup>1</sup> der entsprechenden Wellenzahl und  $e^{i\vec{k}\vec{x}}$  die zeitlich konstanten Fouriermoden. Für die Fourierkoeffizienten gilt

$$\hat{u}_j(\vec{k}, t) = F_{\vec{k}} \{u_j(\vec{x}, t)\} = \frac{1}{L^3} \int_0^L \int_0^L \int_0^L u_j(\vec{x}, t) e^{-i\vec{k}\vec{x}} dx_1 dx_2 dx_3 , \quad (2.34)$$

mit  $F_{\vec{k}}$  als Fourier-Operator der Fourieranalyse. Die Fourierkoeffizienten enthalten also die zeitabhängige Information über das turbulente Geschwindigkeitsfeld. Die einzelnen Moden erfüllen die Orthonormalbedingung, wodurch für zwei Wellenzahlenvektoren gilt:

$$\int_0^L e^{i\vec{k}\vec{x}} e^{-i\vec{k}'\vec{x}} d\vec{x} = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} = \begin{cases} 1, & \vec{k} = \vec{k}' \\ 0, & \vec{k} \neq \vec{k}' \end{cases} . \quad (2.35)$$

Für die zeitliche Entwicklung eines Fourierkoeffizienten  $\hat{u}_i(\vec{k}, t)$  ergibt sich aus der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichung (2.31):<sup>2</sup>

$$\frac{d\hat{u}_j}{dt} + \nu k^2 \hat{u}_j = - \left( \delta_{jk} - \frac{k_j k_k}{k^2} \right) \hat{G}_k . \quad (2.36)$$

Die linke Seite enthält die Zeitableitung der Mode und den viskosen Term, die rechte Seite den konvektiven Term  $\hat{G}_k$ . In obiger Gleichung ist der Druckterm mit Hilfe der Poissongleichung ersetzt worden [51]. Die linke Seite hängt nur von der Mode  $\hat{u}_j(\vec{k}, t)$  ab, auf der

<sup>1</sup>Der Fourierkoeffizient erfüllt die konjugierte Symmetrie  $\vec{\hat{u}}(\vec{k}) = \vec{\hat{u}}^*(-\vec{k})$ , wobei \* den konjugiert komplexen Koeffizienten bezeichnet

<sup>2</sup>Es gilt  $\vec{k} = k_1 e_1 + k_2 e_2 + k_3 e_3$  und  $k_i^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k^2$

rechten Seite beschreibt der nicht lineare Term die Interaktion zwischen den einzelnen Moden:

$$\hat{G}_i(\vec{k}, t) = ik_j \sum_{\vec{k}'} \sum_{\vec{k}''} \hat{u}_j(\vec{k}') \hat{u}_i(\vec{k}'') \delta_{\vec{k}, \vec{k}'+\vec{k}''} . \quad (2.37)$$

Für die zeitliche Entwicklung eines Koeffizienten  $\hat{u}_j$  einer Mode  $\vec{k}$  liefert der nicht lineare Term einen Beitrag aus allen Moden  $\vec{k}'$  und  $\vec{k}''$  der Komponenten  $\hat{u}_j(\vec{k}', t)$  und  $\hat{u}_i(\vec{k}'', t)$ , wenn die Wellenzahlen  $\vec{k}'$  und  $\vec{k}''$  sich zu  $\vec{k}$  addieren. Der nicht lineare Term ist also für die Kopplung zwischen allen Moden verantwortlich. Gibt es nur eine Mode oder ist der nicht lineare Term sehr klein gegenüber dem viskosen Term (was bei sehr kleinen Reynolds Zahlen der Fall ist) so ist die rechte Seite von Gleichung (2.36) gleich Null<sup>3</sup>. Die Mode  $\hat{u}_i(\vec{k}, t)$  klingt demnach exponentiell mit  $\nu k^2$  ab. Existieren zwei Moden  $\vec{k}'$  und  $\vec{k}''$ , ergibt deren Addition durch den nicht linearen Term eine dritte Mode  $\vec{k}$ , die bei ausreichend hoher Reynolds Zahl nicht sofort wieder abklingt. Durch den nicht linearen Term kann so eine neue Mode angefacht werden. Der nicht lineare Term ist daher für den Energietransfer zwischen den einzelnen Moden verantwortlich, wobei die turbulente kinetische Energie einer Mode im Fourierraum definiert ist als:

$$\hat{E}(\vec{k}, t) = \frac{1}{2} \left\langle \hat{u}_i(\vec{k}, t) \hat{u}_i^*(\vec{k}, t) \right\rangle . \quad (2.38)$$

Die gesamte turbulente kinetische Energie ergibt sich aus der Summe der Energien der einzelnen Moden:

$$k(t) = \frac{1}{2} \langle u_i u_i \rangle = \sum_{\vec{k}} \hat{E}(\vec{k}, t) = \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \Psi_{ii}(\vec{k}, t) d\vec{k} , \quad (2.39)$$

wobei  $\Psi_{ij}(\vec{k}, t)$  der Geschwindigkeitsspektrumstensor ist.<sup>4</sup> Aus Gleichung (2.36) lässt sich eine Transportgleichung für die zeitliche Entwicklung von  $\hat{E}(\vec{k}, t)$  herleiten:

$$\frac{d}{dt} \hat{E}(\vec{k}, t) = \hat{T}(\vec{k}, t) - 2\nu k^2 \hat{E}(\vec{k}, t) . \quad (2.40)$$

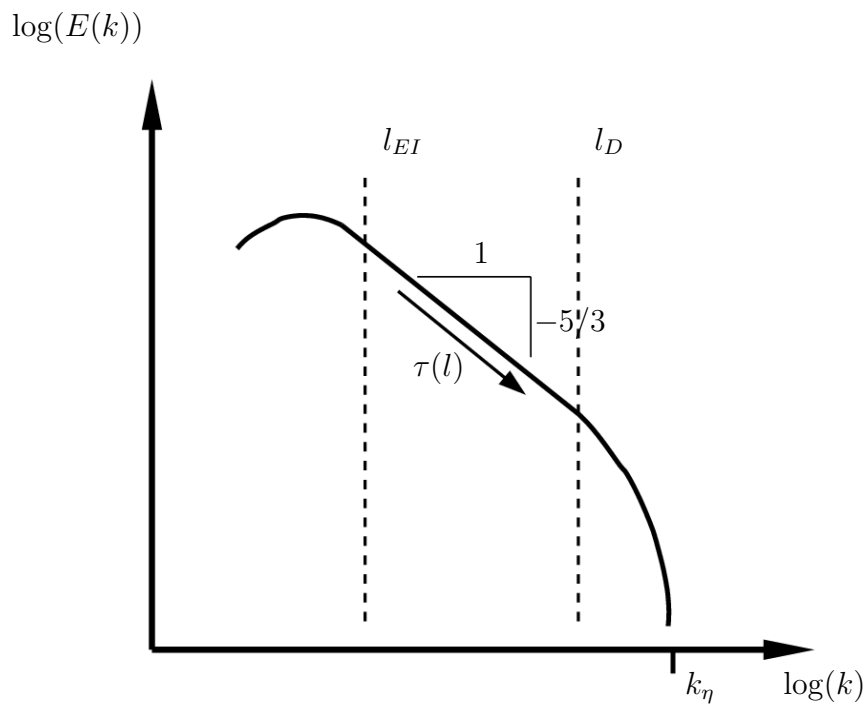
<sup>3</sup>Es entstehen im allgemeinen auch Moden der Wellenlänge  $2\vec{k}$

<sup>4</sup>Dieser bildet mit dem zwei Punkt Korrelationstensor  $R_{ij}(\vec{r}, t) = \langle u_i(\vec{x}, t) u_j(\vec{x} + \vec{r}, t) \rangle$  ein Fouriertransformationspaar [51]

Der letzte Term auf der rechten Seite ist die Dissipation der turbulenten kinetischen Energie in der Mode  $\vec{k}$ , der erste Term der rechten Seite entspricht dem Transfer von Energie zwischen der Mode  $\vec{k}$  und allen anderen Moden auf Grund des nicht linearen Terms  $\hat{G}_i(\vec{k}, t)$ . Information über die Verteilung der Energie auf die einzelnen Moden bzw. Wellenzahlen liefert z. B. die eindimensionale Spektralfunktion der Energie:

$$E(k, t) = \oint \frac{1}{2} \Psi_{ii}(\vec{k}, t) dS(|\vec{k}|) . \quad (2.41)$$

Dieses Integral entspricht der Energie die bei einer bestimmten Wellenzahl vorhanden ist und wird über die Integration über die Oberfläche  $S(|\vec{k}|)$  einer Kugel mit dem Radius  $|\vec{k}|$  im Wellenzahlenraum gewonnen.



**Abbildung 2.1:** Eindimensionales turbulentes Energiespektrum

Abbildung (2.1) zeigt beispielhaft ein Energiespektrum  $E(k)$  einer turbulenten Strömung bei hoher Reynolds Zahl.  $\tau(k)$  ist dabei die spektrale Energietransferrate

$$\tau(k) = - \int_0^k \hat{T}(s, t) ds . \quad (2.42)$$

Die Wellenzahlen  $k = \frac{2\pi}{l}$  lassen sich einer charakteristischen Größe  $l$  zuordnen. Somit zeigt das Energiespektrum die Verteilung der turbulenten kinetischen Energie auf Strukturen der

Größe  $l$ . Diese Strukturen kann man als "Wirbel" bezeichnen, und besitzen ein charakteristisches Geschwindigkeitsmaß  $u(l)$ . Die großen Strukturen  $l = l_0$  tragen die meiste Energie  $E(\frac{2\pi}{l_0}) \propto u(l_0)^2$  und werden durch eine große Reynolds Zahl  $Re = u(l_0)l_0/\nu$  charakterisiert. Die turbulente kinetische Energie wird bei diesen großen Strukturen produziert und dann über die nicht lineare Interaktion der einzelnen Moden mit der Transferrate  $\tau(l) \propto u(l)^3/l$  zu den kleineren Wirbeln übertragen<sup>5</sup>. Die Energie in den Wirbeln sowie die für diese charakteristische Reynolds Zahl nimmt mit steigender Wellenzahl bzw. kleiner werdender Länge  $l$  ab. Die Energie wird bei den kleinsten Wirbeln schließlich mit der Dissipationsrate  $\epsilon$  abgebaut. Im Zustand des spektralen Gleichgewichts fließt genau soviel Energie zu den kleinen Skalen wie dort dissipiert wird, also ist  $\tau(l) = \epsilon$ . Demnach werden die kleinen Skalen nur durch  $\epsilon$  und  $\nu$  bestimmt. Formt man mit diesen beiden Größen Zeit-, Längen- und Geschwindigkeitsmaße erhält man die Kolmogorov [27] Skalen:

$$\eta_K = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4}, \quad (2.43)$$

$$t_\eta = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2}, \quad (2.44)$$

$$u(\eta_k) = (\epsilon\nu)^{1/4}. \quad (2.45)$$

Die mit diesen Skalen gebildete Reynolds Zahl ist  $Re = u(\eta_K)\eta_K/\nu = 1$ , was zeigt, dass diese Skalen die kleinsten und dissipativsten Strukturen beschreiben. Die Kolmogorov'schen Hypothesen besagen, dass bei ausreichend hoher Reynolds Zahl kleine Strukturen statistisch isotrop sind und nur durch  $\epsilon$  und  $\nu$  bestimmt werden. Man unterscheidet dabei zwischen den energietragenden, anisotropen Strukturen  $l > l_{EI}$  ("energy containing range") und den isotropen kleinen Strukturen  $l < l_{EI}$  ("universal equilibrium range"). Die kleinen Strukturen sind bei jeder Strömung statistisch ähnlich, wenn sie mit den Kolmogorov Skalen normiert werden. Diesen universellen Bereich des Spektrums unterteilt man in einen konvektiven  $l_{EI} > l > l_D$  ("inertial subrange") und viskosen  $l_D > l$  ("dissipative range") Bereich. Im konvektiven Bereich ist die Reibung  $\nu$  zu vernachlässigen und daher ergibt sich für diesen Bereich das Kolmogorov  $-5/3$  Spektrum:

$$E(k) = C\epsilon^{3/2}k^{-5/3}. \quad (2.46)$$

Den Gesamtprozess der Energieproduktion bei den großen Skalen und anschließender Übertragung der Energie zu immer kleineren "Wirbeln" bezeichnet man als Wirbelkaskade. In einer turbulenten Strömung bei großer Reynolds Zahl wird die Energie z. B. durch die Randbedingungen bei einer charakteristischen Länge zugeführt. Die Energiekaskade auf Grund der Triadeninteraktion sorgt dafür, dass diese Energie sich auf viele Moden verteilt, von den großen zu den kleinen Skalen fließt, wo sie schließlich in innere Energie dissipiert wird. Je

<sup>5</sup>Dies ist das Produkt des inversen Zeitmaßes  $t = \frac{l}{u(l)}$  und der Energie  $E(l) = u(l)^2$



höher die Reynolds Zahl, desto breiter des Spektrum im Wellenzahlraum. Da durch die Triadeninteraktion *alle* Moden Einfluss auf die zeitliche Entwicklung einer bestimmten Mode  $k$  nehmen, müssen für eine korrekte Lösung der Navier-Stokes Gleichung auch alle Moden berücksichtigt werden, sprich das Rechengebiet muss groß genug sein um die größten Strukturen abzubilden und das Maschengitter muss fein genug sein um die größten Moden abzubilden. Bei hoher Reynolds Zahl ist dies wegen begrenzten Ressourcen wie Rechenzeit und Speicherplatz nicht mehr möglich und man wird dazu gezwungen gewisse Strukturen zu modellieren. So geht man z. B. bei einer LES dazu über die Navier-Stokes Gleichungen zu filtern, d.h. alle Wellenzahlen über einer bestimmten Grenzwellenzahl  $k_c$  werden aus der Lösung heraus gefiltert und es wird versucht, deren Auswirkung auf die übrig bleibenden Wellenzahlen durch Modelle abzubilden. Betrachtet man nun den passiven Skalartransport in einer turbulenten Strömung bei hohen Schmidt Zahlen, so tauchen Wellenzahlen im Skalarspektrum auf, die noch größer sind als die Kolmogorov Wellenzahl. Dadurch wird der Punkt, ab dem modelliert werden muss, schon sehr bald erreicht und eine vollständige Simulation der Vermischung ist nicht mehr möglich. Wie bereits erwähnt, ist aber gerade die Modellierung der nicht aufgelösten Skalen des Skalarfeldes für den nicht linearen Reaktionsterm sehr schwierig. Im nächsten Abschnitt soll näher auf das Skalarspektrum und dessen Skalen, speziell im Hinblick auf hohe Schmidt Zahlen eingegangen werden.

## 2.4 Turbulenter Stofftransport bei hohen Schmidt Zahlen

Eine randome, turbulente Strömung wird, auf Grund der Kopplung mit dem Geschwindigkeitsfeld in der Skalartransportgleichung (2.21), zwangsweise ein randomes Skalarfeld erzeugen. Es stellt sich daher, analog zum vorherigen Abschnitt, die Frage nach den Skalen und dem Energiespektrum eines passiven Skalarfeldes in einer turbulenten Strömung, insbesondere bei hohen Schmidt Zahlen. Grundlegende Arbeiten zu auftretenden Skalen und zur Form des Skalarspektrums erfolgten von Batchelor [3], Corrsin [9] und Obukhov [47].

Unter den gleichen Annahmen einer homogenen Turbulenz wie in Kapitel 2.3 kann auch die Skalartransportgleichung im Fourierraum betrachtet werden. Das skalare Energiespektrum wird analog zu Gleichung (2.41) definiert

$$E_{\Phi}(k, t) = \oint \Psi_{\Phi}(\vec{k}, t) dS(|\vec{k}|), \quad (2.47)$$

wobei auch hier  $\Psi_{\Phi}(\vec{k}, t)$  die Spektralfunktion des Skalars ein Fouriertransformationspaar mit der zweipunkt Korrelationsfunktion  $R_{\Phi}(\vec{r}, t)$  bildet. Die skalare Varianz kann aus dem

skalaren Energiespektrum errechnet werden

$$\langle \Phi'^2 \rangle (t) = \int_0^\infty E_\Phi(k, t) dk . \quad (2.48)$$

Auch die skalare Energie wird bei den großen integralen Strukturen der Länge  $L_\Phi$  erzeugt. Das integrale Längenmaß hängt dabei von den Randbedingungen ab. Unter Annahme der Kolmogorov'schen Hypothesen sind auch die statistischen Eigenschaften des kleinskaligen Skalarfeldes homogen, isotrop und stationär und unter diesen Annahmen im spektralen Gleichgewicht. Stellt man die Transportgleichung für die skalare Energie (2.47) im Fourierraum auf<sup>6</sup>

$$\frac{dE_\Phi(k, t)}{dt} = T_\Phi(k, t) - 2\Gamma k^2 E_\Phi(k, t) , \quad (2.49)$$

so besteht auch hier die rechte Seite aus der skalaren spektralen Transferfunktion  $T_\Phi$  und dem dissipativen Term  $2\Gamma k^2 E_\Phi(k, t)$ . Die spektrale Transferfunktion ist wiederum ein Resultat des konvektiven Terms der Skalartransportgleichung und beschreibt den Fluss skalarer Energie zwischen den Wellenzahlen durch die Triadeninteraktion. Die skalare spektrale Energietransferrate ist definiert als

$$\tau_\Phi(k, t) = - \int_0^k T_\Phi(s, t) ds \quad (2.50)$$

und entspricht im spektralen Gleichgewicht der Dissipation  $\tau_\Phi(k) = \epsilon_\Phi$ . Bei Wellenzahlen, die groß gegenüber den integralen Strukturen  $L_\Phi$  und klein gegenüber denen der dissipativen Strukturen - sowohl im Skalar- als auch im Geschwindigkeitsfeld sind - kann die molekulare Diffusivität und Viskosität vernachlässigt werden<sup>7</sup>. Das skalare Energiespektrum kann also nur von  $\epsilon_\Phi$ , und  $\epsilon$  abhängen und daher muss das Skalarspektrum die Form:

$$E_\Phi(k, t) = C \epsilon_\Phi \epsilon^{-1/3} k^{-5/3} \quad (2.51)$$

annehmen [3], besitzt also in diesem Bereich die gleiche Abhängigkeit von  $k$  wie das Geschwindigkeitsspektrum. Für den Fall sehr geringer molekularer Diffusivität  $\Gamma$  im Vergleich

<sup>6</sup>Unter Vernachlässigung eines mittleren Gradienten im Skalarfeld

<sup>7</sup>Diesen Bereich nennt man "convective subrange"

zur molekularen Viskosität  $\nu$  werden die dissipativen Effekte auf das Spektrum der turbulenten kinetischen Energie bei kleineren Wellenzahlen einsetzen als für das Spektrum der skalaren Energie. Die Frage wann der dissipative Bereich im skalaren Spektrum einsetzt erklärt Batchelor mit der Annahme, dass der Abbau und die Produktion von skalaren Gradienten im Gleichgewicht stehen und bei einer bestimmten Wellenzahl bzw. Längenmaß stattfindet. Die Produktion bzw. den Transport des skalaren Gradienten  $\frac{\partial\Phi}{\partial x_i} \frac{\partial\Phi}{\partial x_i}$  zu diesem Längenmaß hin erhält er dabei mit der Annahme, dass der Gradient bei verschwindender Diffusivität mit der Rate  $\overline{\omega^2}^{1/2}$  erhöht wird<sup>8</sup>, ein Maß für den Abbau des Gradienten kann aus der Skalartransportgleichung hergeleitet werden. Daraus ergibt sich als kleinstes Längenmaß im Skalarfeld:

$$\eta_B = \left( \frac{\nu \Gamma^2}{\epsilon} \right)^{1/4}. \quad (2.52)$$

Dieses Längenmaß wird als Batchelor-Länge bezeichnet. Setzt man dies ins Verhältnis zur Kolmogorov Länge (2.43) so ergibt sich:

$$\frac{\eta_K}{\eta_B} = \left( \frac{\nu}{\Gamma} \right)^{1/2}, \quad \text{bzw.} \quad \eta_B = \frac{\eta_K}{\sqrt{Sc}}. \quad (2.53)$$

Dabei ist die Schmidt Zahl definiert als das Verhältnis der molekularen Viskosität des Fluids zur molekularen Diffusivität des Stoffes:

$$Sc = \frac{\nu}{\Gamma}. \quad (2.54)$$

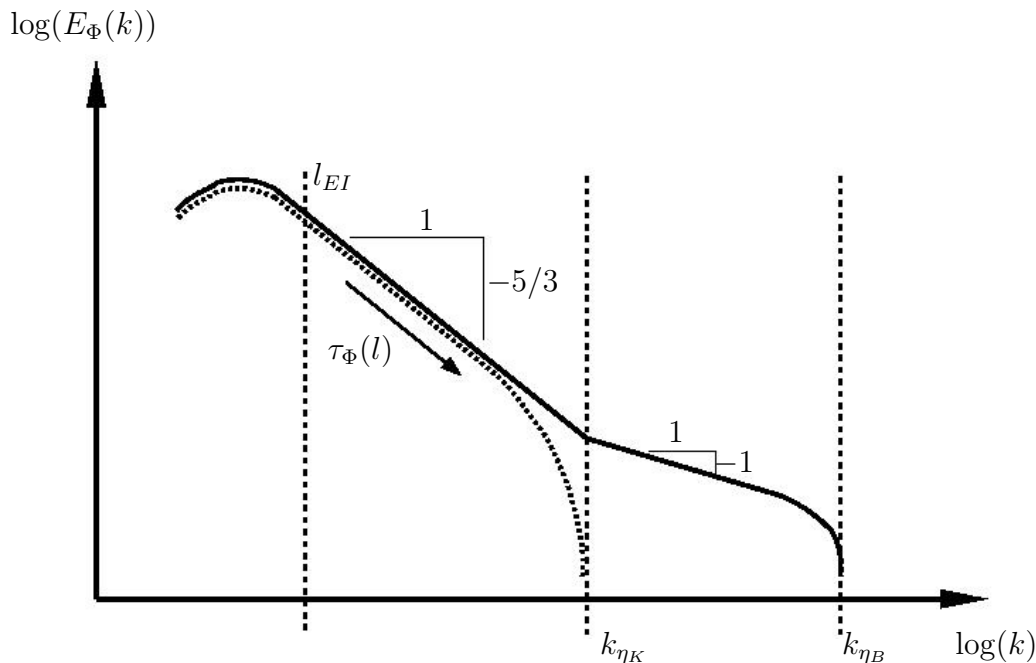
Aus der Voraussetzung, dass die Produktion des skalaren Gradienten bei vernachlässigbarer molekularer Diffusivität angesetzt wird, ergibt sich, dass Gleichung (2.53) nur für hohe  $Sc$  Zahlen gilt. Für  $Sc \leq 1$  ergibt sich  $\eta_B = (\Gamma^3/\epsilon)^{1/4}$ .

Zusammengefasst bedeutet dies, dass das Spektrum von  $E_\Phi(k)$  für Längenmaße  $l$  kleiner als das integrale Längenmaß  $L_\Phi$ <sup>9</sup> von  $\nu$ ,  $\Gamma$ ,  $\epsilon$  und  $\epsilon_\Phi$  abhängt. Sind die Längenmaße in einem Bereich, in dem sowohl  $\nu$  als auch  $\Gamma$  keine Rolle spielen, so fällt auch das skalare Spektrum mit  $\propto k^{-5/3}$  ab. Dieser Bereich wird als "inertial-konvektiver" Bereich bezeichnet. Bei hohen  $Sc$  wird der dissipative Bereich des Geschwindigkeitsspektrum schon erreicht, wenn für das Skalarspektrum die molekulare Diffusivität  $\Gamma$  immer noch keine Rolle spielt. Für diesen Bereich, der als "viskos-konvektiver" Bereich bezeichnet wird<sup>10</sup>, leitet Batchelor die Abhängigkeit  $E_\Phi(k) \propto k^{-1}$  her. Er stellt dabei für ein Fluidelement der Länge  $l < \eta_K$ , das nur konvektive Dehnung erfährt, die Skalartransportgleichung auf und analysiert diese im Fourierraum. Die

<sup>8</sup> $\overline{\omega^2}^{1/2}$  ist dabei der *rms* Wert der Wirbelstärke

<sup>9</sup>Man befindet sich also in der "universal equilibrium range"

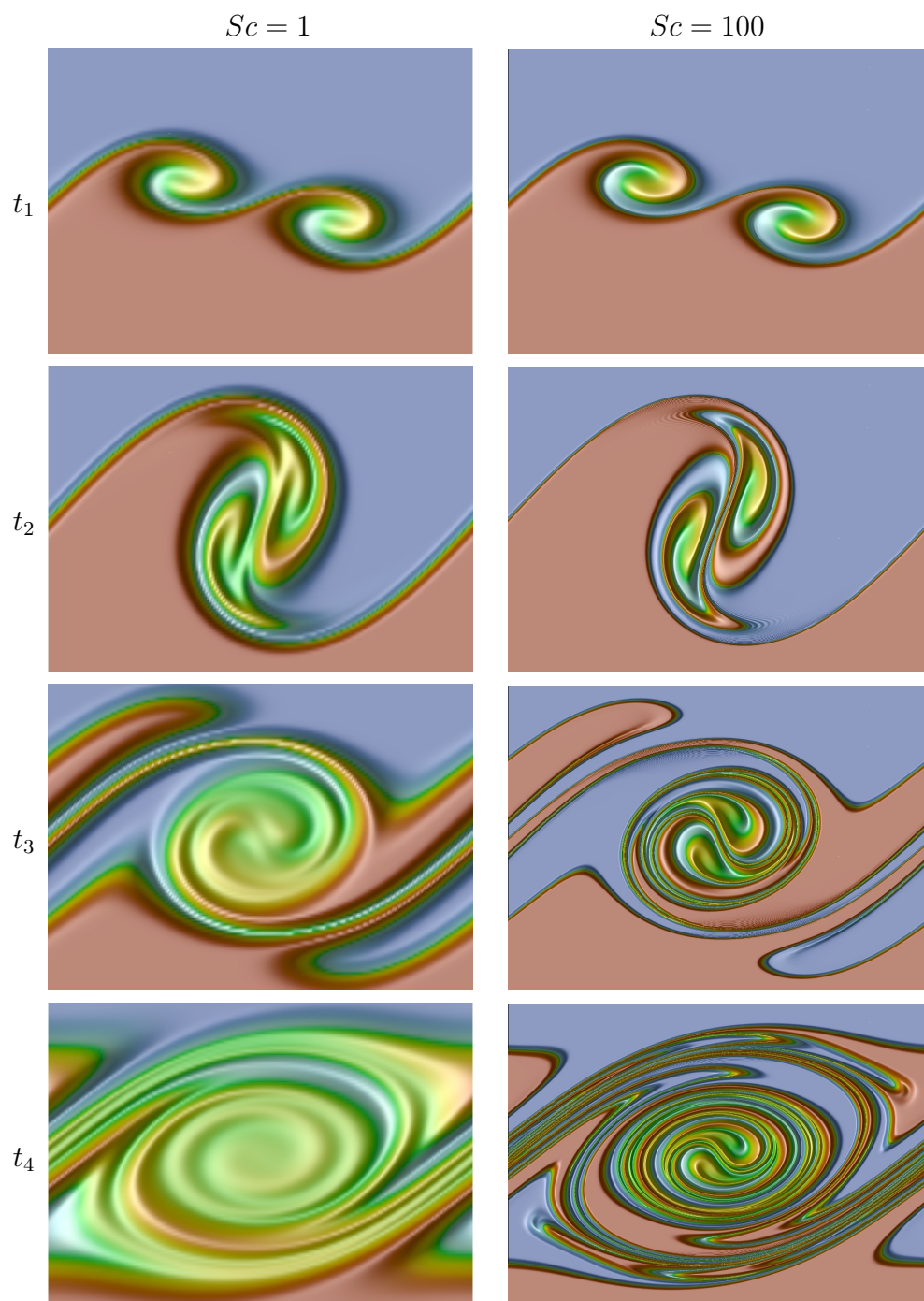
<sup>10</sup>Batchelor bezeichnet diesen als "convection subrange".



**Abbildung 2.2:** Eindimensionales turbulentes skalares Energiespektrum

bestimmende Dehnungsrate ist dabei in der Größenordnung des inversen Kolmogorov'schen Zeitmaßes  $\propto (\epsilon/\nu)^{1/2}$  [3]. Der viskos-konvektive Bereich reicht bis zu der Batchelor Länge  $\eta_B$ , ab der der dissipative Bereich des Skalarspektrums einsetzt. Im Falle von hohen  $Sc$  befindet sich also der viskos-konvektive und dissipative Bereich des Skalarspektrums auf Skalen kleiner als Kolmogorov. Damit wird bei hohen  $Sc$  die Grenze, ab der man zur Modellierung bei der numerischen Simulation von Mischprozessen gezwungen wird, schon bei niedrigen  $Re$  erreicht. Die schematische Darstellung eines eindimensionalen skalaren Energiespektrums bei hoher  $Re$  und hoher  $Sc$  ist in Abbildung (2.2) skizziert.

Um die Abhängigkeit von  $Sc$  zu verdeutlichen zeigt Abbildung (2.3) den zeitlichen Verlauf des Konzentrationsfeldes einer ebenen 2-D Mischungsschicht. Die Mischungsschicht ist eine gegenläufige Strömung, die mit einer Instabilität beaufschlagt wurde. Diese führt zur Bildung zweier Wirbel, die sich im Laufe der Zeit paaren. Die Abbildungen zeigen den Konzentrationsverlauf bei gleicher Strömung aber unterschiedlichen  $Sc$ . Anfänglich unterscheiden sich beide Konzentrationsfelder kaum. Im weiteren Verlauf wird erkennbar, dass sich die Gradienten im Skalarfeld durch die Wirkung der Wirbel erhöhen und die Strukturen verkleinern. Bei  $Sc = 1$  setzt der Ausgleichsprozess durch Diffusion früher ein als bei  $Sc = 100$ , was dazu führt, dass die Strukturen bei  $Sc = 1$  in der Größenordnung des Wirbels bleiben, wohingegen bei  $Sc = 100$  deutlich kleinere Strukturen entstehen. Dieser Prozess veranschaulicht den Unterschied zwischen  $\eta_K$  und  $\eta_B$  bei  $Sc > 1$ . Die hier gezeigten Konzentrationsfelder wurden mit einer direkten numerischen Simulation der Navier-Stokes Gleichungen und der Skalartransportgleichung bestimmt, wobei für die Simulation bei  $Sc = 100$  die Anzahl der Kontrollvolumen um den Faktor 100 höher war als für die Simulation bei  $Sc = 1$ .



**Abbildung 2.3:** Zeitlicher Verlauf der Konzentration in einer 2D Mischungsschicht; links  $Sc = 1$  rechts  $Sc = 100$



# 3 Strömungsmechanik des Mischens

Nach der Einführung der Grundgleichungen und insbesondere des Spektrums der skalaren Energie in Kapitel (2.4) sollen in diesem Kapitel die Begriffe "mischen" und "Mischzeit" geklärt werden. Dazu wird zuerst anhand der spektralen Betrachtungsweise der Mischbegriff mit dem Verkleinern einer Segregationslänge in Verbindung gebracht und ein einfaches Modell zur Berechnung einer globalen Mischzeit in einer voll entwickelten turbulenten Strömung im spektralen Gleichgewicht dargelegt. Im Anschluss wird durch die skalare Varianz und deren Abbau eine Mischzeit definiert, die auch für inhomogenes Vermischen lokal gültig ist und in Reynolds gemittelten Simulationen entweder aus den Resultaten berechnet werden oder auch zur Modellierung benutzt werden kann.

Da die Mischzeit bzw. die Geschwindigkeit des Vermischens durch die skalare Dissipationsrate bestimmt ist und letztendlich die skalare Dissipationsrate eine essentielle Modellgröße darstellt, werden am Ende des Kapitels zwei Modelle für diese Größe vorgestellt. Diese Modelle bieten auch die Grundlage für die spätere Modellierung der skalaren subfilter Dissipationsrate im DNS-FDF Kontext.

## 3.1 Skalen der Vermischung und Mischzeit

In Mischprozessen wird im Allgemeinen versucht eine Substanz (oder auch mehrere) gleichmäßig auf ein Volumen zu verteilen bzw. auf molekularer Ebene zueinander zu bringen. Bezeichnet  $\Phi(x, t)$  die Konzentration, so bedeutet ein voll vermischter Zustand, dass überall die gleiche, zeitlich konstante Konzentration<sup>1</sup> der Substanz herrscht, es keine Konzentrationsunterschiede mehr gibt und der lokale Wert dem Ensemble gemittelten entspricht:

$$\Phi(\vec{x}, t) = \langle \Phi \rangle . \tag{3.1}$$

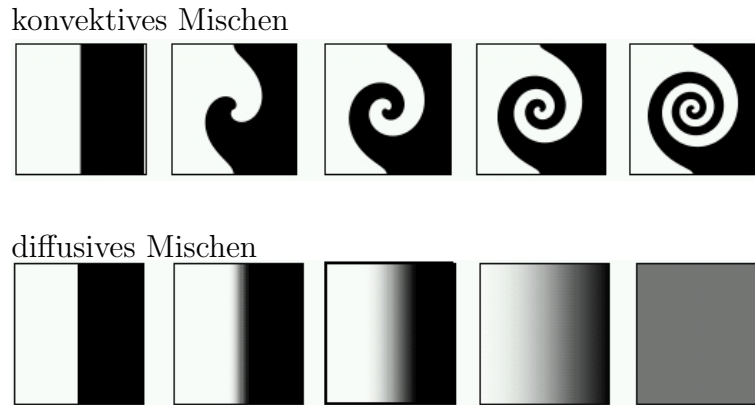
Geht man davon aus dass dies der Endzustand ist und die Substanz mit einer anfänglichen Segregation  $L_\Phi(t = 0)$  initialisiert wurde<sup>2</sup>, so ist der Prozess des Vermischens der Vorgang der den einen in den anderen Zustand überführt und damit das Längenmaß der Segregation auf Null reduziert.

Wie Abbildung (3.1) verdeutlicht findet Vermischung durch zwei simultane Prozesse statt. Zum einen sorgt Diffusion für den letztendlichen Stoffausgleich auf der molekularen Skala,

---

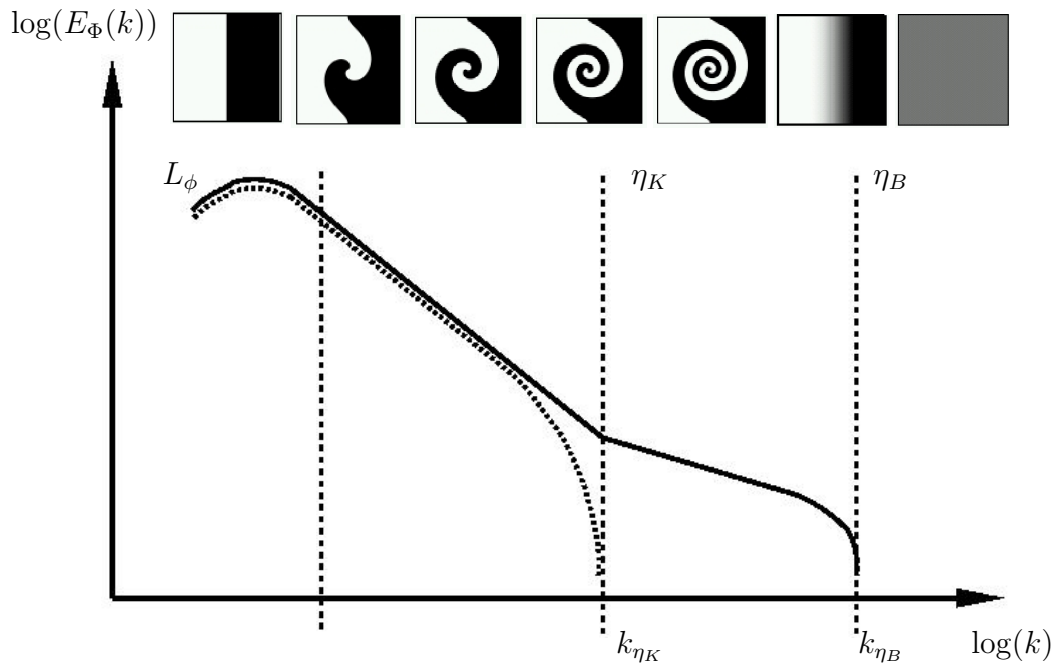
<sup>1</sup>In diesem Zusammenhang wird keine chemische Reaktion betrachtet

<sup>2</sup> $L_\Phi$  könnte z. B. der Abstand der Zuströmrohre in einem T-Mischer sein



**Abbildung 3.1:** Unvermischter Anfangszustand und voll vermischter Endzustand

zum anderen sorgt mechanisches Verkleinern eines charakteristischen Längenmaßes für eine Beschleunigung der Diffusion. Das diffusive Mischen ist dabei meist (und besonders bei hohen  $Sc$ ) langsamer als das mechanische Mischen.



**Abbildung 3.2:** Eindimensionales turbulentes skalares Energiespektrum

Abbildung (3.2) zeigt den Zusammenhang zwischen dem skalaren Energiespektrum, der charakteristischen Längenmaße und der Mischprozesse. In einer turbulenten Strömung mit einem voll entwickelten skalaren Energiespektrum sind gleichzeitig alle Längenmaße, von  $L_\phi$  bis  $\eta_B$  vertreten. Das integrale Längenmaß  $L_\phi$  wird durch die Randbedingungen vorgegeben. Es entspricht z. B. dem Abstand der beiden Zuströmröhre in einem T-Mischer [62] durch welche die unterschiedlichen Edukte in das Mischvolumen gelangen. Durch diesen Abstand wird al-



so das Längenmaß der initialen Segregation der beiden Edukte festgelegt. Das mechanische Verkleinern wird bei der turbulenten Vermischung durch die turbulenten Wirbel erreicht. Diese verkleinern das skalare Längenmaß von einer integralen Skala  $L_\Phi$  hinunter bis zum Batchelor Längenmaß  $\eta_B$  (Kapitel 2.4). Erst bei dieser Längenskala ist die Zeitkonstante des diffusiven Mischens klein genug, um eine Rolle zu spielen und die Konzentrationsunterschiede in den durch das konvektive Vermischen entstandenen Lamellen auszugleichen<sup>3</sup>. Da für Strukturen, die größer als das Batchelor Längenmaß  $l_\Phi > \eta_B$  sind, die molekulare Diffusion vernachlässigbar ist, bleibt der Skalar bei Strukturen dieser Größenordnung segregiert. Das bedeutet dass die turbulenten Wirbel die skalaren Strukturen zwar mechanisch verkleinern, aber der Skalar auf molekularer Ebene noch nicht vermischt ist. Daher nennt man das Mischen bei Skalen  $l_\Phi > \eta_B$  *Makro-* und *Mesomischen* und bei Skalen  $l_\Phi \approx \eta_B$  *Mikromischen*.

Für viele Mischvorgänge ist die Mischzeit, also die Zeit die benötigt wird um von  $L_\Phi$  (der anfänglichen Segregation) zum Batchelor Längenmaß  $\eta_B$  (bei dem molekulare Vermischung herrscht) zu gelangen, eine entscheidende Größe. So ist z. B. diese Mischzeit entscheidend für den Übersättigungsaufbau bei Fällungsreaktionen und daher bestimmend für die Partikelgrößenverteilung [21, 58, 60]. Eine einfache Abschätzung der Mischzeit zeigt Fox [16] mit der phänomenologischen Differentialgleichung für ein Längenmaß  $l_\Phi(t)$ , das die Segregation im Skalarfeld charakterisieren soll:

$$\frac{Dl_\Phi(t)}{Dt} = -\frac{1}{t_M}l_\Phi(t). \quad (3.2)$$

$1/t_M$  ist dabei die Mischrates bzw. Mischfrequenz. Bei einem voll entwickelten Spektrum entspricht die Mischrates im inertial-konvektiven Bereich  $L_\Phi > l_\Phi > \eta_K$  dem Zeitmaß des spektralen turbulenten Energietransfers:

$$t_M \approx t_{st} = \frac{kE_\Phi(k, t)}{\tau_\Phi(k, t)} = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \left(\frac{l_\Phi}{\eta_K}\right)^{2/3}. \quad (3.3)$$

Im viskos-konvektiven Bereich  $\eta_K > l_\Phi > \eta_B$  entspricht die Mischrates der Kolmogorov Zeit<sup>4</sup>:

$$t_M = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2}. \quad (3.4)$$

Setzt man die Mischrates (3.3) und (3.4) in Gleichung (3.2) ein und löst diese für die jeweiligen Grenzen der Längenmaße, also von  $L_\Phi$  bis  $\eta_K$  mit (3.3) und von  $\eta_K$  bis  $\eta_B$  mit (3.4), so er-

<sup>3</sup>Genau auf diesem Zusammenhang basiert das Batchelor Längenmaß

<sup>4</sup>siehe auch Kapitel (2.4)

gibt sich die totale Mischzeit aus der Summe der beiden Lösungen:

$$t_{mix} \approx \frac{3}{2} \left( \frac{L_\Phi}{L_u} \right)^{2/3} \frac{k}{\epsilon} + \frac{1}{2} \ln(Sc) \left( \frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2}. \quad (3.5)$$

$L_u = k^{3/2}/\epsilon$  ist dabei das integrale Längenmaß der Strömung. Ist die Mischzeit größer als die Zeitkonstante der chemischen Reaktion  $t_R$  so hat das turbulente Vermischen einen maßgeblichen Einfluss auf die Reaktion. Der letzte Term auf der rechten Seite ist die Zeit die benötigt wird um das Längenmaß von  $\eta_K$  auf  $\eta_B$  zu reduzieren und nimmt mit steigender  $Sc$  zu. Die Mischzeit nach Gleichung 3.5 gibt also eine globale Abschätzung für die Vermischung in einem Volumen, wie z. B. einem Rührkessel, mit voll entwickelter turbulenter Strömung. Ausschlaggebend für die Mischzeit ist also das Verhältnis der Integralen Längenmaße des Skalars und der Strömung  $L_\Phi/L_u$ , die Intensität der Turbulenz  $k/\epsilon$  sowie die Schmidt Zahl. Für einen Rührkessel lässt sich damit also grob, durch die baulichen Maßnahmen ( $L_\Phi/L_u$ ) sowie durch den Energieeintrag des Rührwerks ( $k/\epsilon$ ), die Mischzeit abschätzen. Für detailliertere Aussagen oder für die Mischmodellierung selbst ist Gleichung (3.5) wenig hilfreich.

## 3.2 Vermischung als Abbau skalarer Varianz

Wie bereits erwähnt besteht ein voll vermischter Zustand wenn überall der gleiche, zeitlich konstante Skalarwert  $\langle \Phi \rangle$  herrscht. Ein Maß für die Abweichung des Skalars von seinem Mittelwert ist die skalare Varianz und es lassen sich bei inhomogenen Strömungen mit mittleren Gradienten im Skalarfeld zwei Varianzen definieren. Bewegt sich z. B. der Skalar, bedingt durch die Randbedingungen, zwischen 0 und 1, so stellt der Wert  $\Phi = 0.5$  den voll vermischten Zustand dar. Die Abweichung des lokalen Mittelwerts von diesem perfekt vermischten Mittelwert  $\xi'^2 = (\langle \Phi \rangle(\vec{x}, t) - 0.5)^2$  stellt dann die "large scale" Varianz (LSV) [16, 33, 62] dar, die Abweichung des instantanen, lokalen Wertes vom lokalen Mittelwert  $\langle \Phi'^2 \rangle(\vec{x}, t)$  die "small scale" Varianz (SSV), wobei  $\Phi'(\vec{x}, t)$  die lokale und instantane Fluktuation ist. Die SSV wird im Allgemeinen als skalare Varianz bezeichnet und diese kann aus der Integration über die Spektralfunktion des Skalars (2.48) berechnet werden.

Ist die skalare Varianz gleich Null, so ist der Skalar gleich seinem (lokalen) Mittelwert und demnach (lokal) voll vermischt. Der Abbau von SSV entspricht demnach dem Meso- und Mikromischen und aus der Geschwindigkeit des Abbaus lässt sich eine Mischzeit herleiten. Die Transportgleichung für die skalare Varianz (SSV) ergibt sich aus Gleichung (2.21)<sup>5</sup>:

$$\frac{\partial \langle \Phi'^2 \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle \Phi'^2 \rangle}{\partial x_j} = -2 \langle \Phi' u'_j \rangle \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial x_j} - 2\Gamma \left\langle \left( \frac{\partial \Phi'}{\partial x_j} \right)^2 \right\rangle + \Gamma \frac{\partial^2 \langle \Phi'^2 \rangle}{\partial x_j^2} - \frac{\partial \langle u'_j \Phi'^2 \rangle}{\partial x_j}. \quad (3.6)$$

<sup>5</sup>Hier für eine Spezies und für die Abweichung von den Reynoldsmittelwerten

Der erste Term auf der rechten Seite ist üblicherweise größer Null [23,25] und ist deswegen ein Produktionsterm. Dieser Produktionsterm taucht mit umgekehrten Vorzeichen in der Transportgleichung für die LSV auf und wirkt dort als Senkenterm. Der zweite Term ist die Dissipation  $\epsilon_\Phi$  der skalaren Varianz und ist immer negativ. Die letzten beiden Terme entsprechen dem molekularen und turbulenten Transport. Die linke Seite entspricht der substantiellen Änderung der skalaren Varianz. In einer homogenen, isotropen und turbulenten Strömung ohne mittleren Skalargradienten vereinfacht sich die Gleichung zu:

$$\frac{D \langle \Phi'^2 \rangle}{Dt} = -\epsilon_\Phi. \quad (3.7)$$

Die vorhandene skalare Varianz wird durch die Dissipation abgebaut. Mit der skalaren Varianz selbst und der skalaren Dissipationsrate lässt sich die Mikromischzeit  $t_\Phi$  bestimmen

$$t_\Phi = \frac{2 \langle \Phi'^2 \rangle}{\epsilon_\Phi}, \quad (3.8)$$

welche die Geschwindigkeit für den Abbau der skalaren Varianz (SSV) beschreibt und damit die Vermischung charakterisiert. Bei der Betrachtung des skalaren Energiespektrums (2.2) wird sämtliche skalare Varianz mit  $\tau_\Phi$  zu den dissipativen Skalen transportiert, wo die skalare Energie mit der Dissipation  $\epsilon_\Phi$  abgebaut wird. Der Produktionsterm von SSV führt auf allen Wellenzahlen dem skalaren Energiespektrum Energie zu. Eine Makromischzeit lässt sich Analog aus dem Quotienten der LSV über den Senkenterm definieren:

$$t_{LS} = \frac{\xi'^2}{-2 \langle \Phi' u'_j \rangle \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial x_j}}. \quad (3.9)$$

Diese Zeitkonstante gibt Aufschluss über die Geschwindigkeit mit der der lokale Mittelwert zum voll vermischten Mittelwert tendiert. In vielen Mischproblemen ist diese Makromischzeit größer als die Mikromischzeit. Dieser makroskopische Mischprozess wird durch die gängigen Modellierungsstrategien wie RANS oder LES gut abgebildet, da dieser Mischprozess durch die große Skalen bestimmt ist, und muss daher nicht gesondert modelliert werden. Die Mikromischzeit hingegen charakterisiert die Vermischung auf molekularer Ebene und ist daher für Prozesse wie chemische Reaktion von entscheidender Bedeutung. Zwar kann Mikromischen erst nach dem Makromischen ablaufen, aber von Simulation. bzw. Modellierungsseite betrachtet ist das Makromischen leicht zugänglich, das für chemische Reaktion wichtige Mikromischen nicht. Die Bestimmung der skalaren Dissipationsrate nimmt daher in der Modellierung eine wichtige Stelle ein und deswegen soll im nächsten Abschnitt näher auf Modelle für die skalare Dissipationsrate eingegangen werden.

### 3.3 Modellierung der Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate

Wie in den vorherigen Abschnitten deutlich wurde, ist die Mikromischzeit  $t_\Phi$  bzw. die skalare Dissipationsrate

$$\epsilon_\Phi(\vec{x}, t) = 2\Gamma \left\langle \frac{\partial \Phi'}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi'}{\partial x_i} \right\rangle (\vec{x}, t) \quad (3.10)$$

eine entscheidende Größe für die Mischmodellierung [16], da diese die Geschwindigkeit der Vermischung bestimmt. Die bis jetzt angestellten Betrachtungen gingen von einer voll entwickelten turbulenten Strömung im spektralen Gleichgewicht aus, d.h. die dissipativen Skalen sind im Gleichgewicht mit den energietragenden Skalen. Somit ist der Fluss von skalarer Energie  $\tau_\Phi$  gleich der Dissipation  $\epsilon_\Phi$  und hängt von der Form der Spektren ab. Setzt man die skalare Varianz und die skalare Dissipationsrate in Bezug zu der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipation der turbulenten kinetischen Energie erhält man das "mechanical-to-scalar time-scale" Verhältnis  $R$  [16]:

$$R = \frac{k}{\epsilon} \frac{\epsilon_\Phi}{\langle \Phi'^2 \rangle}. \quad (3.11)$$

Bei hohen turbulenten Reynoldszahlen  $Re_L$ , also wenn die Spektren universellen Charakter besitzen und voll eingelaufen sind, ist  $R \approx 2$ .  $R$  hängt nur von der Form der Spektren ab und ist unabhängig von  $Sc$ . Praxisnahe Strömungsfälle sind jedoch oft stark inhomogen. Betrachtet man technische Mischer, wie z. B. T-Mischer [57, 59, 62] oder Rührkessel, so findet man Bereiche mit niedrigen Turbulenzintensitäten, Rückvermischung, Rezirkulationszonen und Inhomogenitäten durch die Randbedingungen. Verfolgt man einen Lagrange'schen Fluidballen durch einen T-Mischer, so stellt man fest, dass das turbulente und skalare Spektrum bei Transition durch den Mischer erst aufgefüllt werden muss und unterschiedliche Bahnen stark unterschiedliche  $\epsilon$ -Geschichten erfahren können. Die skalare Dissipationsrate  $\epsilon_\Phi$  (bzw.  $\tau_\Phi$ ) kann also sehr stark im Raum und in der Zeit variieren. Aus diesem Grund wird in Modellen für inhomogenen Vermischung oft eine Transportgleichung für  $\epsilon_\Phi$  aufgestellt und modelliert [16]. Da auch in dem hier entwickelten DNS-FDF Ansatz letztendlich eine Transportgleichung von  $\epsilon_\Phi$ <sup>6</sup> modelliert wird, werden nun zwei Ansätze für die Vorhersage von  $\epsilon_\Phi$  vorgestellt. Der erste Ansatz geht zwar wiederum von einer homogenen Strömung bei hoher Reynoldszahl aus, ermöglicht aber eine dynamische Kopplung mit den großen Skalen über den variablen spektralen Energiefluss  $\tau_\Phi$ . Der zweite Ansatz, das "Spectral Relaxation" Modell von Fox [13, 16], wurde speziell für Strömungen, die sich nicht im spektralen Gleichgewicht befinden, entwickelt.

<sup>6</sup>Allerdings für die subfilter Dissipationsrate

## Modellierung der skalaren Dissipationsrate bei Reynolds-gemittelter Betrachtung

In der Reynolds-gemittelten Betrachtung reduziert sich die Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate in einer homogenen und turbulenten Strömung bei hohen Reynolds Zahlen zu [16]:

$$\frac{d\epsilon_\Phi}{dt} \approx -4\Gamma \left\langle \frac{\partial\Phi'}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \frac{\partial\Phi'}{\partial x_i} \right\rangle - 4 \left\langle \left( \Gamma \frac{\partial^2\Phi'}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 \right\rangle. \quad (3.12)$$

Der erste Term auf der rechten Seite ist der so genannte "vortex-stretching" Term, der zweite Term ist die Dissipation der skalaren Dissipationsrate (im späteren Verlauf Destruktion genannt). Der "vortex-stretching" Term wird, bei einem nicht voll entwickelten skalaren Spektrum, mit zwei Produktionsmechanismen  $V_1$  und  $V_2$  beschrieben.  $V_1$  beschreibt den Transport von spektraler skalarer Energie in den dissipativen Bereich hinein und wird in der RANS modelliert mit [16]:

$$V_1 = C_{V1} Re_L^{1/2} \frac{1}{t_e} \tau_\Phi(k_D, t). \quad (3.13)$$

Bei hohen Reynoldszahlen gilt für die turbulente Reynoldszahl  $Re_L = \frac{k^2}{\epsilon\nu}$  und für die "eddy turnover" Zeit  $t_e = \frac{L_{11}}{k^{1/2}} = \frac{4}{3\pi} \frac{k}{\epsilon}$ . Zusammengefasst ergibt dies:

$$V_1 = C_{V1} \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{(1/2)} \tau_\Phi(k_D, t). \quad (3.14)$$

$\tau_\Phi(k_D, t)$  entspricht der skalaren spektralen Energietransferrate

$$\tau_\Phi(k_D, t) = - \int_0^{k_D} T_\Phi(s, t) ds, \quad (3.15)$$

und entspricht der gesamten Energietransferrate in den dissipativen Bereich des Skalarspektrums ( $k_D \approx k_{DI} \sqrt{Sc}$ ) hinein. Die Zeitkonstante mit der diese Energietransferrate im dissipativen Bereich in eine Dissipationstranferrate umgewandelt wird, ist bei hohen  $Re$  genau die Kolmogorov Zeit. Bei einer Strömung im spektralen Gleichgewicht ist der Fluss von spektraler Energie  $\tau_\Phi(k_D, t) = \epsilon_\Phi$ , da genau soviel spektrale Energie in den dissipativen Bereich fließt wie dort dissipiert wird. Der zweite Produktionsmechanismus  $V_2$  ist die

Vergrößerung bereits vorhandener Dissipation durch Wirbelstreckung und wird modelliert mit:

$$V_2 = C_{V2} \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2} \epsilon_\Phi . \quad (3.16)$$

Auch hier ist das relevante Zeitmaß dieses Prozesses die Kolmogorov Zeit. Der Abbau der Dissipationsrate  $D$  wird modelliert mit:

$$D = C_D \frac{\epsilon_\Phi}{\langle \Phi_D'^2 \rangle} \epsilon_\Phi . \quad (3.17)$$

Dabei ist  $\langle \Phi_D'^2 \rangle$  die skalare Varianz im dissipativen Bereich. Das Zeitmaß mit der die vorhandene Dissipationsrate abgebaut wird entspricht dem gleichen Zeitmaß mit der die skalare Varianz abgebaut wird, da beim Abbau von skalarer Varianz im gleichen Maße der skalare Gradient und damit die Dissipationsrate abgebaut wird. Daraus ergibt sich schließlich

$$\frac{d\epsilon_\Phi}{dt} \approx C_{V1} \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{(1/2)} \tau_\Phi(k_D, t) + C_{V2} \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{(1/2)} \epsilon_\Phi - C_D \frac{\epsilon_\Phi}{\langle \Phi_D'^2 \rangle} \epsilon_\Phi . \quad (3.18)$$

Diese modellierte Gleichung beschreibt den Verlauf der skalaren Dissipationsrate in homogener Turbulenz bei hoher  $Re$ . Die skalare Dissipationsrate befindet sich komplett bei den dissipativen Skalen. Die Kopplung mit den großen Skalen findet über die skalare spektrale Energietransferrate  $\tau_\Phi(k_D, t)$  statt.

## Modellierung der skalaren Dissipationsrate für das Spectral Relaxation Modell

Das Spectral Relaxation (SR) Modell wurde von Fox [13] vorgeschlagen um das turbulente Vermischen von Strömungen, die sich nicht im spektralen Gleichgewicht befinden, zu beschreiben und wurde durch mehrere Publikationen erweitert [14, 15, 71]. In diesem Modell wird die spektrale skalare Energie

$$\langle \Phi'^2 \rangle_n(t) = \int_{k_{n-1}}^{k_n} E_\Phi(k, t) dk \quad (3.19)$$

in einzelnen Wellenzahlbereichen bzw. Bändern  $k_n$  durch gekoppelte Differenzialgleichungen beschrieben. Die Kopplung der skalaren Energie zwischen den einzelnen Wellenzahlbändern erfolgt durch spektrale Transferraten (mit spezifischen Zeitkonstanten) die Forward- und Backscattereffekte abbilden. Zusätzlich taucht in jedem Wellenzahlband ein Produktionsterm auf, der die Produktion von spektraler skalarer Energie durch den mittleren Gradienten beschreibt. Die gekoppelten Transportgleichungen für die skalare Varianz in den einzelnen Wellenzahlbändern lauten:

$$\frac{d \langle \Phi'^2 \rangle_1}{dt} = \tau_1 + \gamma_1 P_\Phi, \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} & \vdots \\ \frac{d \langle \Phi'^2 \rangle_n}{dt} &= \tau_n + \gamma_n P_\Phi, \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\frac{d \langle \Phi'^2 \rangle_D}{dt} = \tau_D + \gamma_D P_\Phi - \epsilon_\Phi. \quad (3.22)$$

$\tau_n$  beschreibt die Transferrate spektraler Energie zwischen den benachbarten Wellenzahlbändern, unter der Annahme, dass die Transferraten lokal im Wellenzahlraum sind:

$$\tau_n = \int_{k_{n-1}}^{k_n} T_\Phi(k, t) dk \quad \text{und} \quad \tau_D = \int_{k_D}^{\infty} T_\Phi(k, t) dk. \quad (3.23)$$

Diese werden modelliert mit

$$\tau_n = \alpha_{(n-1, n)} \langle \Phi'^2 \rangle_{n-1} - \alpha_{(n, n+1)} \langle \Phi'^2 \rangle_n - \beta_{(n, n-1)} \langle \Phi'^2 \rangle_n + \beta_{(n+1, n)} \langle \Phi'^2 \rangle_{n+1} \quad (3.24)$$

Die einzelnen Koeffizienten stehen für vorwärts Kaskade ( $\alpha$ ) bzw. Backscatter ( $\beta$ ) zwischen den benachbarten Wellenzahlbändern  $n$  und  $n \pm 1$ . Der erste Term in Gleichung (3.24) steht also für den Transfer spektraler Energie aus dem Band  $n - 1$ , der zweite Term für den Transfer derselben ins Band  $n + 1$ . Die letzten beiden Terme beschreiben den Backscatter ins Band  $n - 1$  bzw. den aus dem Band  $n + 1$  kommenden.  $P_\Phi = \langle u'_i \Phi' \rangle \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial x_i}$  ist die Produktion von skalarer Varianz, die auf die einzelnen Bänder über den Koeffizienten  $\gamma_n$  aufgeteilt wird. Das Band mit dem Index  $D$  enthält die skalare Energie in den dissipativen Skalen, also bei Wellenzahlen oberhalb  $k_B$ , und auch die gesamte Dissipation der skalaren Varianz  $\epsilon_\Phi$ . Die Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$  können unter der Annahme eines voll entwickelten isotropen Geschwindigkeitsspektrums [13] und spektralen Gleichgewichts [15] hergeleitet werden. Explizit wurde von Fox [13] der Fall für vernachlässigbare Backscattereffekte  $\beta = 0$  betrachtet. Dabei gehen die Koeffizienten  $\alpha$  in Zeitkonstanten über, welche der charakteristischen Transportzeit zwischen zwei Wellenzahlen entspricht [13]. Die Koeffizienten  $\gamma$  werden mit der Annahme bestimmt, dass

das selbstähnliche Skalarspektrum bei  $Sc = 1$  für alle Werte von  $P_\Phi$  identisch ist [15]. Bei hohen turbulenten Reynoldszahlen  $Re_L$  geht dabei  $\gamma_D \rightarrow 0$ .

Zur vollständigen Schließung des Gleichungssystems (3.20) mit (3.22) wird noch ein Modell für die skalare Dissipationsrate benötigt. Fox leitet eine Transportgleichung für die skalare Dissipationsrate  $\epsilon_\Phi$  aus der Transportgleichung für das skalare Energiespektrum  $E_\Phi(k, t)$  (2.49) im Fourierraum her [15, 16]:

$$\frac{\partial E_\Phi(k, t)}{\partial t} = G_\Phi(k, t) + T_\Phi(k, t) - 2\Gamma k^2 E_\Phi(k, t). \quad (3.25)$$

Dies entspricht Gleichung (2.49) mit der Erweiterung um  $G_\Phi$  als Quellterm der skalaren Energie aufgrund des mittleren Skalargradienten. Integriert man diese Gleichung über einzelne Wellenzahlbänder, so erhält man die Gleichungen (3.20) mit (3.22). Multipliziert man Gleichung (3.25) mit  $2\Gamma k^2$  und integriert von  $k_D$  bis  $k = \infty$  ergibt sich:

$$\frac{d\epsilon_{\Phi D}}{dt} = \int_{k_D}^{\infty} 2\Gamma k^2 G_\Phi(k, t) dk + 2\Gamma k_D^2 \tau_\Phi(k_D, t) + 2 \int_{k_D}^{\infty} \frac{1}{t_{st}} D_\Phi(k, t) dk - \int_{k_D}^{\infty} 2\Gamma k^2 D_\Phi(k, t) dk. \quad (3.26)$$

Dabei ist  $D_\Phi = 2\Gamma k^2 E_\Phi$  das skalare Dissipationsspektrum und

$$t_{st}(k, t) = \frac{k E_\Phi(k, t)}{\tau_\Phi(k, t)} \quad (3.27)$$

ein spektrales Zeitmaß. Dieses Zeitmaß ist in dem viskos-konvektiven Bereich ( $\eta_K < l_\Phi < \eta_B$ ) genau  $t_{st} = (\nu/\epsilon)^{1/2}$ . Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (3.26) ist ein Produktionsterm aufgrund des mittleren Skalargradienten und wird modelliert mit:

$$\int_{k_D}^{\infty} 2\Gamma k^2 G_\Phi(k, t) dk = \frac{\epsilon_\Phi}{\langle \Phi'^2 \rangle_D} \gamma_D P_\Phi. \quad (3.28)$$

Der zweite Term entspricht dem Transport von skalärer Dissipationsrate in den dissipativen Bereich hinein.  $\tau_\Phi(k_D, t) = \tau_D$  (siehe Gleichung 3.23) ist die Transferrate von skalärer spektraler Energie in die dissipativen Skalen  $k_D = k_B$ . Aus der Definition der dissipativen Wellenzahl

$$k_D = C_D^{1/2} \sqrt{Sc} k_\eta \approx C_D^{1/2} \sqrt{Sc} \left( \frac{\epsilon}{\nu^3} \right)^{1/4} \quad (3.29)$$



folgt

$$2\Gamma k_D^2 \tau_\Phi(k_D, t) = C_D \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \tau_D. \quad (3.30)$$

Nach Fox [16] und Vedula et al. [71] ist dabei  $C_D = 2\Gamma k_D^2 (\nu/\epsilon)^{1/2} = 0.02$ . Der spektrale skalare Fluss  $\tau_D$  wird dabei nach Gleichung (3.24) bestimmt:

$$C_D \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \tau_D = C_D \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \alpha_{nD} \langle \Phi'^2 \rangle_n - C_D \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \beta_{Dn} \langle \Phi'^2 \rangle_D. \quad (3.31)$$

Im dritten Term auf der rechten Seite kann das Zeitmaß  $t_{st}$  als konstant im viskos-konvektiven Bereich angenommen werden und damit aus dem Integral gezogen werden. Dies ergibt

$$2 \int_{k_D}^{\infty} \frac{1}{t_{st}} D_\Phi(k, t) dk = 2 \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \int_{k_D}^{\infty} D_\Phi(k, t) dk = C_s \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \epsilon_{\Phi D}. \quad (3.32)$$

Der letzte Term auf der rechten Seite entspricht der Destruktion der skalaren Dissipation und wird mit einem Produkt aus der skalaren Dissipationsrate  $\epsilon_{\Phi D}$  und einem inversen Zeitmaß modelliert. Das Zeitmaß entspricht dem Zeitmaß, mit dem die skalare Varianz abgebaut wird, und daher lautet das Modell:

$$\int_{k_D}^{\infty} 2\Gamma k^2 D_\Phi(k, t) dk = C_d \frac{\epsilon_{\Phi D}}{\langle \Phi'^2 \rangle_D} \epsilon_{\Phi D}. \quad (3.33)$$

Da angenommen werden kann, dass die gesamte Dissipation des Skalars sich im dissipativen Bereich abspielt ist  $\epsilon_\Phi = \epsilon_{\Phi D}$  und die modellierte Transportgleichung für die skalare Dissipationsrate lautet:

$$\begin{aligned} \frac{d\epsilon_\Phi}{dt} &= \frac{\epsilon_\Phi}{\langle \Phi'^2 \rangle_D} \gamma_D P_\Phi + C_D \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \alpha_{nD} \langle \Phi'^2 \rangle_n - C_D \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \beta_{Dn} \langle \Phi'^2 \rangle_D \\ &+ C_s \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \epsilon_\Phi - C_d \frac{\epsilon_\Phi}{\langle \Phi'^2 \rangle_D} \epsilon_\Phi. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Fox [15, 16] gibt  $C_d = 3$  aufgrund des Vergleichs der Dissipationsraten beim Abklingen eines passiven Skalars von isotropen Anfangsbedingungen ohne turbulente Vermischung. Vedula

et al. [71] ermittelte für die Koeffizienten  $C_s$  und  $C_d$  funktionale Abhängigkeiten von  $\epsilon$  aus einer DNS von isotroper Turbulenz.

Beide Gleichungen (3.34) und (3.18) modellieren den Transport der skalaren Dissipationsrate wobei Gleichung (3.34) eine Erweiterung von Gleichung (3.18) darstellt. Letztere hat zusätzlich einen Produktionsterm und ermöglicht Backscatter Effekte. Auch beinhaltet diese Gleichung bereits eine Beschreibung des skalaren Energieflusses  $\tau_\Phi$  durch die skalare Varianz und einer Zeitkonstante. In Verbindung mit den Transportgleichungen der skalaren Varianzen stellt das SR-Modell ein komplettes Modell für den Einsatz in einer RANS Methode für inhomogene Strömungen dar. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit stellt sich die Frage nach der Modellierung der skalaren subfilter Dissipationsrate bei einer DNS der Strömung bei hohen  $Sc$ . Dafür stellt Gleichung (3.34) einen idealen Ausgangspunkt dar, da in dieser Gleichung angenommen wird, dass sich die gesamte skalare Dissipation bei den kleinsten Skalen befindet. Mit dieser Annahme ist die zu modellierende subfilter Dissipation im DNS-FDF Ansatz identisch mit  $\epsilon_{\Phi D}$ .

# 4 Numerische Simulation inkompressibler Strömungen

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Simulationen der turbulenten Kanalströmung bei  $Re_\tau = 180$  und  $Sc = 3, 10, 25$  und  $49$  durchgeführt. In diesen Simulationen wurde das Strömungsfeld und das Skalarfeld voll aufgelöst um damit Zugang zu allen, für die Modellierung der Vermischung im DNS-FDF Konzept relevanten Größen zu erhalten. Die Simulation selbst, sowie die Auswertung der Simulation sind in Kapitel 5, die Modellierung der Vermischung im DNS-FDF Kontext ist in Kapitel 7 beschrieben. Für die Strömungssimulationen wurde das an der TU-München entwickelte Finite-Volumen Verfahren "MGLET" verwendet [34,73]. Mit diesem Verfahren wurden bereits sehr erfolgreich mehrere Direkte Numerische Simulationen (DNS) sowie Grobstruktursimulationen (LES) durchgeführt. Die große Zahl an verschiedenen Konfigurationsmöglichkeiten sowie die langjährige Entwicklungsarbeit machen MGLET zu einem leistungsstarken und flexiblen Instrument. Der Code ermöglicht verschiedene räumliche und zeitliche Diskretisierungen, verschiedene Möglichkeiten der Druckkorrektur, das Mitführen von beliebig vielen Skalaren, die Behandlung von komplexen Geometrien durch die "Immersed Boundary" (IB) Methode, den Transport von Lagrange'schen Partikeln sowie die Verwendung verschiedener LES Modelle. Durch die Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen in einem kartesischem Gitter und durch die MPI Parallelisierung ist der Code sehr leistungsfähig und für massiv parallele Rechnungen auf Großrechnern sehr gut geeignet.

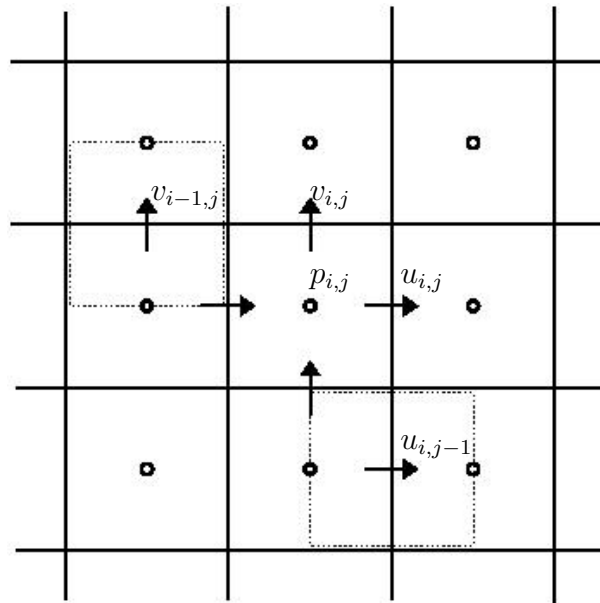
In diesem Kapitel soll die verwendete Methode der numerischen Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen für die DNS der turbulenten Kanalströmung vorgestellt werden. Speziell wird dabei auf das dafür entwickelte Verfahren der "Rekonstruktions-Methode"<sup>1</sup>, die hierarchische Gitterstruktur sowie die Auswertung von verschiedenen Termen entlang von Lagrange'schen Bahnen eingegangen.

## 4.1 Verwendete Finite Volumen Methode

In der Finiten Volumen (FV) Methode werden die Navier-Stokes Gleichungen für inkompressible Strömungen über ein Kontrollvolumen integriert. Die Strömungsvariablen werden in MGLET auf einem nicht äquidistanten kartesischen Gitter in versetzter Variablenanordnung definiert [22]. Für die Bilanzierung der einzelnen volumengemittelten primitiven Variablen  $u$ ,  $v$  und  $w$  ergeben sich daher unterschiedliche Kontrollvolumina. Schematisch ist dies in Abbildung (4.1) dargestellt.

---

<sup>1</sup>In der englischsprachigen Veröffentlichung wurde dieses Verfahren "pre-processing" genannt



**Abbildung 4.1:** Versetzte Variablenanordnung und zwei Kontrollvolumina (gestrichelt)

Für die Bilanzierung der Impulsgleichungen werden die konvektiven Flüsse des Impulses sowie die Spannungen auf den Oberflächen der Kontrollvolumina ausgewertet. Durch diese Formulierung erreicht man, dass die FV-Methode per se konservativ ist, da die Flüsse den Übergang einer Erhaltungsgröße von einem Kontrollvolumen in das benachbarte Kontrollvolumen beschreiben und daher nur über die Randbedingungen Masse bzw. Impuls zu- und abfließen kann. Die Berechnung der Flüsse erfolgt im Normalfall mit einem zentralen Verfahren zweiter Ordnung. Ein neu entwickeltes Verfahren zur Verbesserung der Auflösungseigenschaften wird in Kapitel (4.2) vorgestellt. Bezeichnet man den Beitrag des konvektiven Terms zur Impulsbilanz mit  $K(t)$ , den Beitrag des diffusiven Terms mit  $D(t)$  und des Druckterms mit  $G(t)$  so werden die Volumen gemittelten Geschwindigkeiten zum neuen Zeitpunkt bestimmt mit

$$\tilde{u}^{N+1} = u^N - \int_t^{t+\Delta t} (K(t) + D(t) + G(t)) dt . \quad (4.1)$$

Die vorläufigen Geschwindigkeiten  $\tilde{u}^{N+1}$  erfüllen noch nicht die Bedingung der Divergenzfreiheit. Um divergenzfreie Geschwindigkeiten und ein valides Druckfeld zum neuen Zeitniveau zu erhalten, löst man die Poissongleichung für den Druck und korrigiert mit dem neuen Druckfeld die Geschwindigkeiten. Dieser Ansatz wird als Projektionsmethode bezeichnet [12]. Für die Lösung des Integrals in Gleichung (4.1) wurde in MGLET die Runge-Kutta Methode 3ter Ordnung implementiert [74]. Die Poisson Gleichung wird mit einer Incomplete Lower-Upper (ILU) Zerlegung gelöst [12]. Die Bilanzierung des Skalars geschieht über die Druckzelle. Die Flüsse werden mit den divergenzfreien Geschwindigkeiten bei jedem Runge-Kutta Zwischenschritt bestimmt, so dass die Bilanzierung konservativ ist. Die Berechnung der Flüsse

se wird mit den gleichen numerischen Verfahren durchgeführt wie die Berechnung der Flüsse in der Bilanzierung der Impulsgleichung. Eine grundlegende und ausführliche Beschreibung des Verfahrens findet sich bei Werner [73] und Manhart [34].

## 4.2 Rekonstruktions-Methode zur Verbesserung der Auflösungseigenschaften

Im Allgemeinen ist die numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen effizienter wenn hochauflösende Verfahren benutzt werden. Als hochauflösend werden dabei Verfahren, z. B. für die numerische Interpolation bzw. Ableitung, bezeichnet die einen Großteil der vorhandenen Längenskalen korrekt behandeln. Gerade bei dem hier betrachteten Fall (Kapitel 5) sind eine Vielzahl von unterschiedlichen Skalen vorhanden die durch die numerischen Approximationen korrekt abgebildet werden müssen. Üblicherweise benutzt man für die effiziente Lösung der Navier-Stokes Gleichungen Spektralverfahren, die alle repräsentierten Skalen korrekt abbilden können, oder so genannte Kompaktverfahren, die ähnliche Auflösungseigenschaften wie die Spektralverfahren erreichen können [32]. Der Nachteil dieser Verfahren ist, dass sie nicht für Strömungskonfigurationen mit komplexen Geometrien geeignet sind und auch Schwierigkeiten bei der Parallelisierung bereiten [54]. Aus diesem Grund basieren viele Strömungslöser noch auf Verfahren niedriger Ordnung. Da auch der Strömungslöser MGLET zentrale Schemata zweiter Ordnung verwendet, wurde im Rahmen dieser Dissertation ein explizites Verfahren, basierend auf lokalen Filteroperationen entwickelt, das in Kombination mit dem bereits vorhandenen Verfahren die Auflösungseigenschaften erhöht und im Hinblick auf eine sehr einfache Parallelisierung bei den massiv parallelen Rechnungen gegenüber den herkömmlichen Kompaktverfahren von Vorteil ist. Dieses Verfahren wird als "Rekonstruktions" Verfahren bezeichnet, da es schlecht repräsentierte Skalen durch eine Bearbeitung des Strömungsfeldes vor Anwendung des Verfahrens niedriger Ordnung rekonstruiert. Es wird in diesem Kapitel erläutert.

### 4.2.1 Das Rekonstruktions-Verfahren

Das Rekonstruktions-Verfahren beruht darauf, dass ein Operator  $A$  mit einem Operator  $A_N$  über eine Filteroperation  $G$  verknüpft ist:  $A_N = G * A$ . Erzeugt der Operator  $A$  aus der Funktion  $f(x)$  die Funktion  $g(x) = A * f(x)$  und der Operator  $A_N$  aus der Funktion  $f(x)$  die Funktion  $h(x) = A_N * f(x)$ , so lässt sich  $g(x)$  über die Verknüpfung von  $A$  und  $A_N$  durch die Filteroperation  $G$  aus  $h(x)$  bestimmen. Ist nämlich der Filter  $G$  invertierbar, kann  $g(x)$  aus  $h(x)$  rekonstruiert werden:  $g(x) = G^{-1}h(x) = G^{-1}A_N f(x)$ . Für den Fall, dass die inverse Filteroperation  $G^{-1}$  mit dem Operator  $A_N$  kommutativ ist, lässt sich diese auch in einem *vorbereitenden* Schritt auf die Funktion  $f(x)$  anwenden<sup>2</sup>:  $g(x) = A_N G^{-1} f(x)$ . Bezogen auf die numerische Lösung der Navier-Stokes Gleichungen bezeichnet  $A$  den analytischen Operator der Interpolation bzw. Ableitung und  $A_N$  dessen numerisches und approximatives Pendant. Die Filteroperation  $G$  stellt die Verknüpfung zwischen beiden dar.

<sup>2</sup>Daher die englische Bezeichnung "pre-processing"

Eine exakte Inverse der Filteroperation  $G$  ist im physikalischen Raum schwer zu realisieren. Für die Verbesserung der Auflösungseigenschaften eines numerischen Operators  $A_N$  ist es ausreichend die Inverse  $G^{-1}$  durch eine geeignete Näherung  $Q$  zu approximieren. Mit dieser Näherung als Rekonstruktions-Operator erhält man:

$$g^*(x) = A_N Q f(x) = G A_N Q f(x) = G Q g(x). \quad (4.2)$$

Entspricht  $Q$  einer genauen Näherung von  $G^{-1}$  ist das Produkt  $GQ \approx I$  nahe dem Einheitsoperator  $I$  und damit ist auch  $g^*(x) \approx g(x)$ . Wie man an Gleichung (4.2) sieht, ist  $Q$  also der Rekonstruktions-Operator der *vor* der Anwendung des numerischen Operators  $A_N$  auf die Funktion  $f(x)$  angewandt werden kann um die Auflösungseigenschaften zu verbessern. Eine geeignete Möglichkeit den Rekonstruktions-Operator  $Q$  zu bestimmen, ist die Beziehung für die approximative Entfaltung<sup>3</sup> [68, 69]:

$$Q_M(G) = \sum_{m=0}^M (I - G)^m. \quad (4.3)$$

Durch diese Formulierung kann  $Q_M f(x)$  durch eine wiederholte Anwendung des Filteroperators  $G$  berechnet werden. Bei einer Erhöhung der Gliederanzahl  $M$  nimmt die Genauigkeit des approximierten inversen Filters zu und  $GQ_M \approx I$  gilt für einen größeren Bereich an Wellenzahlen. In Gleichung (4.3) muss allerdings noch der Filter  $G$  durch einen geeigneten Filter  $G'$  approximiert werden, da im physikalischen Raum der aus der Relation  $A_N = GA$  bestimmte Filter  $G$  nicht konstruiert werden kann. In dieser Arbeit wird für den approximativen Filter  $G'$  eine lokale und explizite Formel verwendet. Damit kann die Approximation an die Inverse  $G^{-1} \approx Q_M(G')$  konstruiert werden und schließlich auf das Feld bzw. die Funktion  $f(x)$  als *vorbereitender* Rekonstruktions-Operator angewandt werden. Wird danach der gebräuchliche numerische Operator  $A_N$  auf das auf diese Weise vorbereitete Feld angewandt, hat das kombinierte Gesamtverfahren  $A_N Q_M(G')$  über einen großen Bereich von Wellenzahlen deutlich verbesserte Auflösungseigenschaften im Vergleich zum Ausgangsoperator  $A_N$ . Im folgenden Abschnitt sollen nun diese theoretischen Überlegungen auf die konkrete Operation der ersten Ableitung am Beispiel einer Finite-Differenzen Formulierung umgesetzt werden.

### Rekonstruktions-Methode für die erste Ableitung

Für die a priori Analyse der Funktionsweise und Herleitung der Rekonstruktions-Operatoren wird die Fourieranalyse von periodischen Funktionen  $f(x)$  ( $0 < x < 2\pi$ ) mit diskreten Funktionswerten  $f_j$  ( $j = 0, 1, \dots, N$ ) an diskreten und äquidistanten Stützstellen  $x_j = j\Delta x$  benutzt. Die Fourierkoeffizienten der Funktion lauten  $\hat{f}_k$  ( $k = 0, 1, \dots, N/2$ ). Die Faltung mit dem Filter  $g(x) = G * f(x)$  entspricht im Fourierraum der Multiplikation der Fourierkoeffizienten

<sup>3</sup>Faltung und Entfaltung bezeichnet hier das Paar Filterung - inverse Filterung

$\hat{g}(k) = \hat{G}(k)\hat{f}(k)$ , wobei  $\hat{G}(k)$  die Fourierkoeffizienten der Filtertransferfunktion sind. Falls die Funktion  $f(x)$  keine Anteile bei Wellenzahlen besitzt die größer als die maximal darstellbare Wellenzahl  $k_{max} = N/2$  sind, kann die erste Ableitung der Funktion  $f(x)$  exakt aus den Fourierkoeffizienten der Ableitung rekonstruiert werden:  $\hat{f}_x(k) = ik\hat{f}(k)$ . Betrachtet man die zentrale Differenz zweiter Ordnung für die erste Ableitung

$$f_x(x_j) = \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2), \quad (4.4)$$

und ersetzt die Funktionen  $f(x)$  und  $f_x(x)$  in Gleichung (4.4) mit den Fourierreihen

$$f(x_j) = \sum \hat{f}(k) \exp(ikx_j), \quad f_x(x_j) = \sum \hat{f}_x(k) \exp(ikx_j), \quad (4.5)$$

so lässt sich durch Gleichsetzen der einzelnen Moden eine implizierte Filtertransferfunktion  $\hat{f}_x = \hat{G}(k)ik\hat{f}$  bestimmen. Damit ist  $\hat{G}(k) = \sin(k\Delta x)/(k\Delta x)$  die Filtertransferfunktion und  $k^* = k\hat{G}(k)$  die modifizierte Wellenzahl [32]. Die Differenz  $1 - \hat{G}(k)$  ist dabei ein Maß für den Fehler in der Auflösung, der hier monoton mit der Wellenzahl zunimmt. Wendet man in einer Rekonstruktions-Operation die regularisierte, inverse Filteroperation

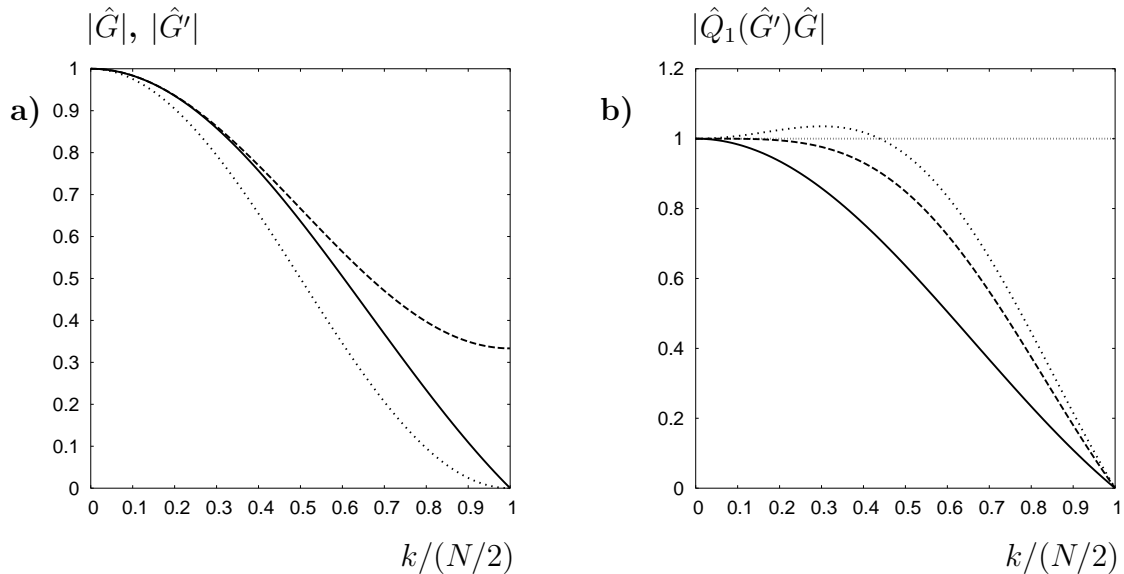
$$\hat{Q}(k) = \begin{cases} 1/\hat{G}(k) & (k = 0, 1, \dots, N/2 - 1) \\ 0 & (k = N/2) \end{cases} \quad (4.6)$$

auf die Funktion  $f(x)$  an, und im Anschluss den finiten Differenzen Operator (4.4), entspricht das Resultat fast der spektralen ersten Ableitung.  $\hat{Q}(k)$  ist das regularisierte Inverse, da es, im Gegensatz zum exakten Inversen, über den ganzen Wellenzahlbereich  $0 \leq k \leq N/2$  definiert ist. Da es im physikalischen Raum nur schwer möglich ist die Filtertransferfunktion  $\hat{G}(k)$  exakt nachzubauen und diese zu invertieren, wird hier die approximative Entfaltung (4.3) mit einem Filter  $G' \approx G$  im physikalischen Raum benutzt um die Auflösungseigenschaften nach obigem Schema zu verbessern. Daher sind zwei Aspekte für die Verbesserung der Auflösungseigenschaften entscheidend: Die Qualität der Approximation  $G' \approx G$  und die Anzahl  $M$  der Glieder in der Reihe (4.3). Für die Approximation des impliziten Filters der zentralen Differenz zweiter Ordnung ist ein geeigneter lokaler Filter mit kompakten Differenzenstern das gleitende Mittel

$$\bar{f}_j = \alpha_{-1}f_{j-1} + \alpha_0f_j + \alpha_1f_{j+1} = G' * f_j. \quad (4.7)$$

Um geeignete Koeffizienten zu finden, werden zuerst Standardfilter untersucht, die z. B. für die Integration im Raum die Simpsonregel und die Trapezregel benutzen. Für die Trapezregel

sind die Koeffizienten  $\alpha_{\pm 1} = 1/4$  und  $\alpha_0 = 1/2$  und für die Simpsonregel  $\alpha_{\pm 1} = 1/6$  und  $\alpha_0 = 4/6$ .



**Abbildung 4.2:** (a): Filtertransferfunktionen  $\hat{G}$  für zentrale Differenz zweiter Ordnung (durchgezogene Linie),  $\hat{G}'$  für Trapezregel (Punkte) und Simpsonregel (Striche). (b): Zusammengesetzte Transferfunktion  $\hat{Q}_1(\hat{G}')\hat{G}$  für Trapezregel (Punkte) und Simpsonregel (Striche) sowie ursprüngliche Filtertransferfunktion  $\hat{G}$  (durchgezogene Linie).

Abbildung 4.2a zeigt die Filtertransferfunktion  $\hat{G}$  für die zentrale Differenz zweiter Ordnung (4.4) sowie  $\hat{G}'$  für die Trapez- und die Simpsonregel. Der Filter mit der Trapezregel zeigt nur bei sehr kleinen Wellenzahlen keine Abweichung vom exakten Filter, wohingegen der Filter mit der Simpsonregel über einen weiten Bereich niedriger Wellenzahlen dem exakten Filter folgt und erst bei größeren Wellenzahlen abweicht. Die einfachste Invertierung nach Gleichung (4.3) ist für  $m = 1$ .

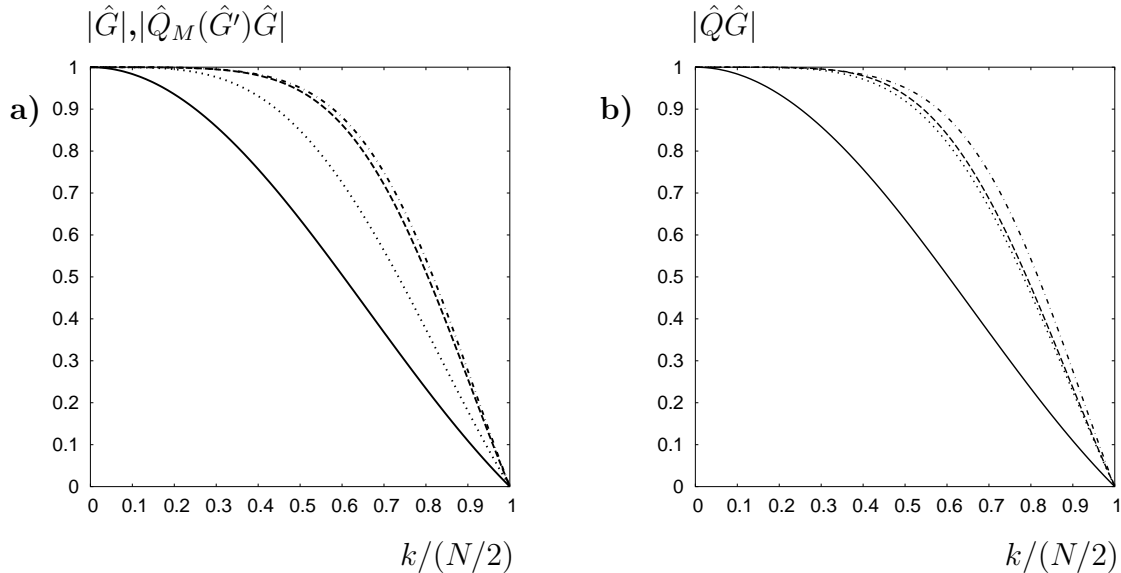
$$Q_1(G')f_j = f_j + (1 - G') * f_j. \quad (4.8)$$

Die Auflösungseigenschaften der Kombination aus Rekonstruktions-Operation und zentraler Differenz zweiter Ordnung werden durch die Transferfunktion von  $\hat{Q}_M(\hat{G}')\hat{G}$  verdeutlicht. Die Abbildung 4.2b zeigt die resultierende Transferfunktion für den Trapez- und die Simpsonregel kombiniert mit der Entfaltung mit zwei Gliedern  $\hat{Q}_1(\hat{G}')\hat{G}$ , zusätzlich zu der Transferfunktion ohne Rekonstruktion. Wie erwartet verbessert der Rekonstruktions-Schritt die Auflösungseigenschaften wobei die Verwendung der Simpsonregel ein besseres Ergebnis liefert als die Trapezregel. Verwendet man für  $G'$  die Simpsonregel und substituiert  $f_j$  mit  $Q_1 f_j$  in Gleichung (4.4), so erhält man genau die Formel für die zentrale Differenz vierter Ordnung. Die Verbesserung durch den Rekonstruktions-Schritt manifestiert sich sowohl in der Auflösungseigenschaft als auch in der Ordnung des Verfahrens.



### Entfaltung mit mehrgliedriger Reihe

Unter Einbeziehung von mehreren Gliedern in der Entfaltungsbeziehung (4.3) (Erhöhung von  $M$ ) werden die Auflösungseigenschaften weiter verbessert.



**Abbildung 4.3:** (a): Filtertransferfunktionen  $\hat{G}$  für zentrale Differenz zweiter Ordnung (durchgezogene Linie),  $\hat{Q}_1(\hat{G}')\hat{G}$  (Punkte),  $\hat{Q}_3(\hat{G}')\hat{G}$  (Striche) und  $\hat{Q}_4(\hat{G}')\hat{G}$  (Strich-Punkt), alle mit der Simpsonregel; (b):  $\hat{G}$  (durchgezogene Linie),  $\hat{Q}_2(\hat{G}')\hat{G}$  mit der Simpsonregel (Punkte),  $\hat{Q}_2(\hat{G}'_1\hat{G}'_2)\hat{G}$  mit 6ter Ordnung (Striche) und  $\hat{Q}_4(\hat{G}')\hat{G}$  mit der Simpsonregel (Strich-Punkt)

Wie Abbildung 4.3a zeigt, verbessert die Erhöhung der Gliederanzahl bei der Entfaltung von zwei ( $i\hat{Q}_1(\hat{G}')\hat{G}$ ) auf drei Glieder ( $\hat{Q}_2(\hat{G}')\hat{G}$ ) den Bereich der gut aufgelösten Wellenzahlen von  $(0, 0.2k_{max})$  auf  $(0, 0.3k_{max})$ . Eine weitere Erhöhung von  $M$ , z. B. auf vier bzw. fünf Glieder, führt zu keiner entscheidenden Verbesserung der Auflösungseigenschaften der zusammengesetzten Transferfunktion. Die Ursache liegt darin, dass die zugrunde liegende Approximation von  $G$  mit  $G'$  nur bis Wellenzahlen von ungefähr  $0.3k_{max}$  den Filter  $G$  gut approximiert.

Das Erhöhen der Anzahl der Glieder in der Entfaltungsbeziehung (4.3) führt dazu, dass der resultierende explizite Finite Differenzen Operator einen breiteren Differenzenstern benutzt. Definiert man den primären Filter  $G'$  auf einem schmalen Differenzenstern mit undefinierten Koeffizienten, können die Koeffizienten des Filters durch einen Koeffizientenabgleich mit einer expliziten Formel höherer Ordnung bestimmt werden. Benutzt man in jedem Glied der Entfaltungsbeziehung den gleichen Filter ist die Zahl der unbestimmten Koeffizienten festgelegt. Wenn mehrere Glieder in der Entfaltungsbeziehung in Betracht gezogen werden ist es nicht möglich alle Koeffizienten mit einer expliziten Formulierung hoher Ordnung abzugleichen. Dieses Problem kann dadurch umgangen werden indem *unterschiedliche* Filter in jedem einzelnen Glied der Entfaltung benutzt werden. Für die drei gliedrige Entfal-

tung

$$Q_2 * f_j = 3 * f_j - 3G' * f_j + G'^2 * f_j \quad (4.9)$$

kann ein unterschiedlicher Filter  $G'_i$  für jedes Glied benutzt werden:

$$Q_2 * f_j = 3 * f_j - 3G'_1 * f_j + G'_1 * G'_2 * f_j. \quad (4.10)$$

Die beiden Filter  $G'_1$  und  $G'_2$  können dabei dem gleitenden Mittel nach Gleichung (4.7) entsprechen. Es stehen damit vier unbekannte Koeffizienten zur Verfügung die mit den Koeffizienten eines expliziten zentralen Differenzen Verfahren 6ter Ordnung abgeglichen werden können. Nach diesem Abgleich ergeben sich die Koeffizienten zu

$$\alpha_0^{G'_2} = c, \quad \alpha_{\pm 1}^{G'_2} = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A}, \quad (4.11)$$

$$\alpha_0^{G'_1} = \frac{-23}{(15 * E)}, \quad \alpha_{\pm 1}^{G'_1} = \frac{2}{60E^2}, \quad (4.12)$$

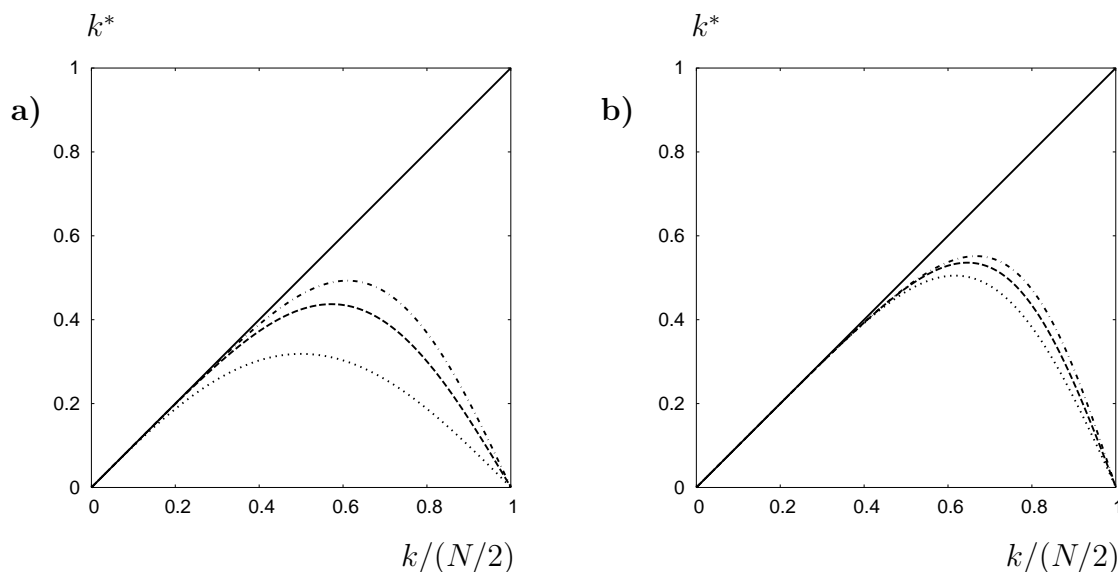
mit

$$E = c - 3.0, \quad A = \frac{23}{15E^2}, \quad B = -\frac{3}{10E}, \quad C = -\frac{1}{30}; \quad (4.13)$$

$c \neq 3$  ist dabei ein freier Parameter.

Mit einer drei gliedrigen Entfaltung kann maximal ein Verfahren sechster Ordnung erreicht werden. Abbildung 4.3b zeigt eine leichte Verbesserung der Transferfunktion der Rekonstruktion sechster Ordnung nach Gleichung (4.10) mit den Koeffizienten nach (4.11) mit (4.13), im Vergleich zu der Rekonstruktions-Operation nach Gleichung (4.9) mit der Simpsonregel.

Mit der hier erarbeiteten Methode sind viele verschiedene Kombinationen aus einzelnen Filtern  $G'_i$  und Anzahl der Glieder  $M$  in der Entfaltungsbeziehung (4.3) möglich. In dieser Arbeit wurden nur lokale und explizite Filter mit kleinem Differenzenstern im physikalischen Raum berücksichtigt, was in einer Verbesserung der Auflösung sowie der Ordnung resultiert. Dies wird erreicht *ohne* die zugrunde liegende Struktur von validierten und getesteten Programmen zu verändern. Die effektivste Kombination an Filtern  $G'_i$  und Gliederzahl  $M$  soll durch den Vergleich mit Standardmethoden anhand der modifizierten Wellenzahl bestimmt werden.



**Abbildung 4.4:** Modifizierte Wellenzahl der ersten Ableitung: (a) zweiter Ordnung explizit (2E, Punkte), vierter Ordnung explizit (4E, Striche) und  $\hat{Q}_2(\hat{G}')\hat{G}$  (QM2, Strich-Punkt); (b) sechster Ordnung explizit (6E, Punkte),  $\hat{Q}_4(\hat{G}')\hat{G}$  (QM4, Striche) und vierter Ordnung kompakt (4C, Strich-Punkt)

Abbildung 4.4 zeigt die modifizierte Wellenzahl für explizite und kompakte Standardmethoden, sowie für die zusammengesetzte modifizierte Wellenzahl der Kombination des expliziten Schemas zweiter Ordnung (2E) mit den Rekonstruktions-Operatoren  $\hat{Q}_2(\hat{G}')$  (QM2) und  $\hat{Q}_4(\hat{G}')$  (QM4). Dabei wurde  $G'$  mit der Simpsonregel berechnet. Die Rekonstruktions-Methode mit der drei gliedrigen Entfaltung ist deutlich besser als die explizite Methode vierter Ordnung (4E), die fünf gliedrige Entfaltung zeigt allerdings keine deutliche Verbesserung mehr. Die drei gliedrige Entfaltung mit unterschiedlichen Filtern  $G'_1$  und  $G'_2$  entspricht exakt der zentralen Differenz sechster Ordnung (6E) und liegt dementsprechend auf der identischen Kurve für die modifizierte Wellenzahl. Der Vergleich zeigt, dass die drei gliedrige Entfaltung mit unterschiedlichen Filtern  $G'_1$  und  $G'_2$  den besten Kompromiss zwischen Genauigkeit und numerischen Aufwand darstellt. Aus diesem Grund wurde dieses Schema für die DNS der turbulenten Kanalströmung (Kapitel 5) benutzt.

### Rekonstruktions-Methode für die FV Methode

Im vorigen Abschnitt wurde die Rekonstruktions-Methode am Beispiel der Finiten Differenzen hergeleitet. Da das Programm MGLET mit der Finite Volumen Methode arbeitet, soll hier nun die Rekonstruktions-Methode auf die FV Methode ausgeweitet werden. In den FV Methoden werden die Erhaltungsgleichungen über jedes Kontrollvolumen integriert und man erhält ein System von Gleichungen, die den Zusammenhang zwischen der zeitlichen Entwicklung der volumengemittelten Erhaltungsgrößen und den Flüssen an den Zelloberflächen beschreibt. Ist  $u(x, t)$  die kontinuierliche Variable, so ist die volumengemittelte Variable

bestimmt zu

$$\bar{u}(x_j) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_j - \Delta x/2}^{x_j + \Delta x/2} u(x) dx. \quad (4.14)$$

Die Flüsse an den Zellgrenzen sind bei eindimensionaler Betrachtung durch die Punktwerte von  $u$  an den Zellgrenzen gegeben, müssen aber aus den Volumen gemittelten Werten  $\bar{u}$  berechnet werden. Für die Lösung der Navier-Stokes Gleichungen müssen zwei Größen aus den Volumen gemittelten Werten an den Zellgrenzen berechnet werden: Der Wert der Variable selbst (Punktwert) und der Wert der ersten Ableitung an der Zellgrenze. Üblicherweise werden die Werte an der Zellgrenze  $u_{j\pm 1/2}^B = u(x_j \pm \Delta x/2)$  mit einer Interpolation niedriger Ordnung aus den Volumen gemittelten Werten bestimmt. Für die folgende Diskussion wird die Indizierung der Punkte um  $1/2$  verschoben, da die absolute Indizierung irrelevant ist. Der Punkt an einer beliebigen Zellfläche wird mit  $u^B(x_j)$  bezeichnet, und die angrenzenden Volumen gemittelten Werte mit  $\bar{u}(x_{j\pm 1/2})$ . Eine Interpolation zweiter Ordnung für die Werte an der Zellgrenze ist

$$u_j^B = \frac{1}{2}(\bar{u}_{j-1/2} + \bar{u}_{j+1/2}) + O(\Delta x^2). \quad (4.15)$$

Ersetzt man die Variable  $u(x)$  in Gleichung (4.14) mit ihrer Fourierrepräsentation  $u(x_j) = \sum \hat{u}(k) \exp(ikx_j)$  erhält man den Zusammenhang zwischen den Volumen gemittelten Werten und den Punktwerten:

$$\hat{u}(k) = \frac{\sin(k\Delta x/2)}{k\Delta x/2} \hat{u}(k). \quad (4.16)$$

Setzt man die Fourierreihen für  $u^B$  und  $\bar{u}$  in Gleichung (4.15) ein und ersetzt die Volumen gemittelten Werte durch Gleichung (4.16), erhält man eine Relation zwischen dem interpolierten Wert an der Zellgrenze  $\hat{u}_j^B(k)$  und dem exakten Wert  $\hat{u}_j(k)$ :

$$\hat{u}_j^B(k) = \frac{\sin(k\Delta x/2)}{k\Delta x/2} \cos(k\Delta x/2) \hat{u}_j(k) = \frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} \hat{u}_j(k). \quad (4.17)$$

Die implizierte Filtertransferfunktion  $G = \sin(k\Delta x)/(k\Delta x)$  der Interpolation im FV-Kontext ist also die selbe wie für die erste Ableitung im FD-Kontext aus dem vorangegangenen Kapitel. Um den Fehler dieser numerischen Approximation zu reduzieren, kann auch ein approximativ inverses  $Q$  als Rekonstruktions-Operation auf die Volumen gemittelten Werte  $\bar{u}$  vor

der Interpolation angewandt werden. Da der implizierte Filter  $G$  mit dem der ersten Ableitung identisch ist, kann der selben Rekonstruktions-Operator  $Q_2(G')$  verwendet werden wie im vorangegangenen Abschnitt, um die Ordnung und die Genauigkeit der Interpolation 4.15 zu erhöhen.

## 4.2.2 Ergebnisse der Auflösungsverbesserung

Die Verbesserungen der Auflösungseigenschaften kann anschaulich durch die Simulation einer 1D Konvektions-Differentialgleichung mit konstanter Konvektionsgeschwindigkeit  $c$  gezeigt werden. Die DGL lautet

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (4.18)$$

Für diese Gleichung sind FV und FD Verfahren identisch. Die Initiallösung wird durch zwei komplementäre, auf dem Rechengebiet ( $0 < x < 1.0$ ) periodische, Error-Funktionen vorgegeben:

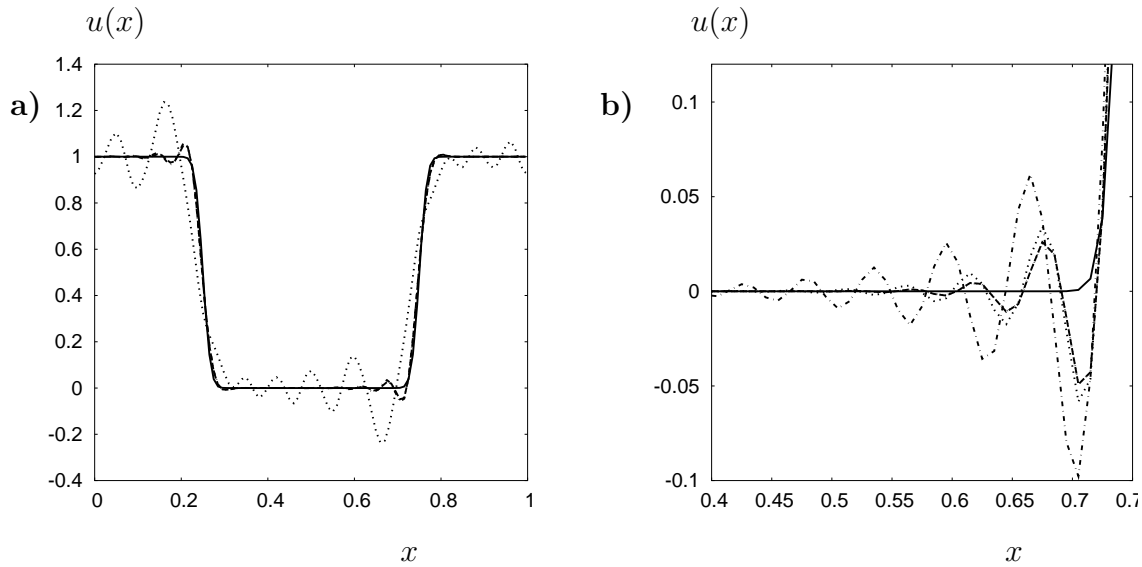
$$u(x, t = 0) = \begin{cases} \operatorname{erfc}((x(i) - 0.25) * 50)/2 & (x \leq 0.5) \\ \operatorname{erfc}((-x(i) + 0.75) * 50)/2 & (x > 0.5). \end{cases} \quad (4.19)$$

Mit dieser Anfangsbedingung ist im Berechnungsgebiet ein breites Wellenzahlspektrum vorhanden und Auflösungsfehler zeigen sich mit der Zeit als Veränderung der Form des Profils<sup>4</sup>. Die Lösung bleibt für alle Zeiten  $t > 0$  periodisch und erlaubt damit den Gebrauch periodischer Randbedingungen. Das Rechengebiet  $0 < x < 1$  wurde durch 100 äquidistante Stützstellen diskretisiert. Für die Zeitintegration wurde ein Runge-Kutta Verfahren vierter Ordnung mit  $CFL = 1.0$  gewählt<sup>5</sup>. Der konvektive Term wurde mit der kompakten zentralen Differenz vierter (4C), der expliziten zentralen Differenz zweiter Ordnung (2E) sowie mit den Rekonstruktions-Methoden  $QM2$  und  $QM4$  diskretisiert.

Abbildung 4.5 zeigt die berechnete Lösung für verschiedene Diskretisierungen nach 100 Zeitschritten, zusammen mit der analytischen Lösung. Mit der Rekonstruktions-Methode  $QM2$  ist die Lösung kaum von der Lösung mit dem Kompaktverfahren (4C) zu unterscheiden. Beide Verfahren zeigen nur kleine parasitäre Schwinger stromauf des Gradienten (Abb. 4.5a). Abbildung 4.5b vergleicht die Rekonstruktions-Methode ( $QM2$  und  $QM4$ ) mit den kompakten und expliziten Differenzen Verfahren 4C und 4E. Die Rekonstruktions-Methode und das kompakte Verfahren sind deutlich genauer als das explizite Verfahren vierter Ordnung (4E). Nach 100 Zeitschritten ist die Lösung mit der fünf gliedrigen Entfaltung ( $QM4$ ) von der Lösung mit dem Kompaktverfahren nicht zu unterscheiden.

<sup>4</sup>Dies beruht auf dem Phasenfehler. Zentrale Differenzen erhalten auf äquidistanten Gittern die Amplitude aber nicht die Phase. Dadurch werden bestimmte Wellenzahlanteile mit unterschiedlicher Geschwindigkeit transportiert und Über- und Unterschwinger entstehen.

<sup>5</sup> $CFL = \frac{c\Delta t}{\Delta x}$



**Abbildung 4.5:** Numerische Lösung von Gleichung (4.18) mit Initiallösung (4.19) nach einer Periode; (a) analytische Lösung (Linie), zweiter Ordnung explizit (2E, Punkte), vierter Ordnung kompakt (4C, Striche) und Rekonstruktions-Methode QM2 (Strich-Punkt); (b) vergrößerter Bereich nahe des steilen Gradienten, analytische Lösung (Linie), Rekonstruktions-Methode QM2 (Punkte), Rekonstruktions-Methode QM4 (Striche), vierter Ordnung kompakt (4C, kleine Punkte) und vierter Ordnung explizit (4E, Strich-Punkt)

### 4.2.3 Zusammenfassung

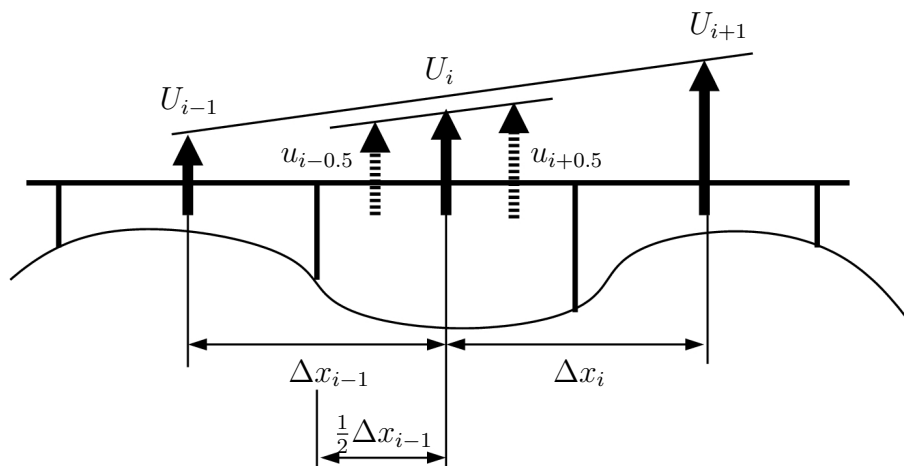
Durch das hier vorgestellte Verfahren konnte die Ordnung und die Auflösungseigenschaften der Approximation der konvektiven und diffusiven Terme in der diskretisierten Navier-Stokes Gleichung von zweiter auf sechster Ordnung erhöht werden. Der Vorteil dieser Methode liegt vor allem in der einfachen Implementierung in das vorhandene Programm MGLET und in der einfachen Parallelisierung. Die Parallelisierung ist deswegen einfach, weil nur explizite Filteroperationen mit kompakten Differenzensternen verwendet werden und so nach jeder Filteroperation immer nur eine Randschicht zwischen den Prozessoren ausgetauscht werden muss. Zu beachten ist, dass die Verbesserung der Ordnung sich in MGLET nur auf die Diskretisierung des diffusiven Terms und auf die transportierte Größe im konvektiven Term beschränkt. Die Methodik wurde also auch für die Verbesserung der Auflösungseigenschaften der im FV-Kontext benötigten ersten Ableitung an der Zellgrenze  $\partial u_j^B / \partial x$  benutzt. Details zur Entwicklung dieser Rekonstruktions-Operatoren, die Erweiterung auf nicht äquidistante Gitter und die Behandlung von Rändern, weitere Testfälle sowie der Einbau in das Programm MGLET finden sich in der, im Rahmen dieser Arbeit entstandenen, Veröffentlichung [64]. Die Verbesserung der Ordnung in der Druckkorrektur und in den transportierenden Größen würde wesentlich mehr Aufwand bedeuten und war nicht Gegenstand dieser Arbeit.

### 4.3 Hierarchische Gitterstruktur für die Simulation des Skalartransportes bei hohen Schmidt-Zahlen

In dieser Arbeit wurden Direkte Numerische Simulationen (DNS) der turbulenten Kanalströmung bis zu  $Sc = 49$  durchgeführt. Bei einer DNS werden alle relevanten Längen- und Zeitskalen durch das Berechnungsgitter und die verwendeten numerischen Approximationen aufgelöst. Es müssen also die kleinsten Strukturen sowohl im Skalar- als auch in den Geschwindigkeitsfeldern aufgelöst werden. In Kapitel 2.4 wurde gezeigt, dass bei  $Sc > 1$  das kleinste Längenmaß im Skalarfeld um  $1/\sqrt{Sc}$  kleiner ist als das Kolmogorov Maß  $\eta_K$  (Batchelor [3]).

Dadurch ergeben sich unterschiedliche Auflösungsbedingungen an das Skalarfeld und an das Geschwindigkeitsfeld. Die Berechnung der Strömung kann daher auf einem gröberen Gitter erfolgen als die Berechnung des Skalarfeldes. Dies ermöglicht es Rechenzeit zu sparen, da die Lösung der Navier-Stokes Gleichung auf weniger Gitterpunkten erfolgen kann als die Lösung der Skalartransportgleichung. Um dies zu nutzen, wurde eine hierarchische Gitterstruktur in MGLET implementiert und geeignete Interpolationen zwischen den Gittern entwickelt.

Um den Verwaltungsaufwand im Code zu minimieren und bereits vorhandene Mehrgitterstrukturen in MGLET zu nutzen, wurde eine Verfeinerungsstufe mit dem Faktor zwei in jede Raumrichtung implementiert. Die Strömung wird auf einem Gitter mit der doppelten Gitterweite in jeder Raumrichtung, verglichen mit der Gitterweite des Skalargitters, gelöst. Das Strömungsgitter wird als Grobgitter, das Skalargitter als Feingitter bezeichnet. Für die Lösung der Skalartransportgleichung wird das Geschwindigkeitsfeld auf dem Feingitter benötigt. Es wurde eine konservative Interpolation entwickelt, welche die Massenerhaltung auf dem Feingitter garantiert und zweiter Ordnung auf äquidistanten und nicht äquidistanten Gittern ist.



**Abbildung 4.6:** Schematische Darstellung des Differenzensterns für die konservative Interpolation

Der Differenzenstern für die konservative Interpolation ist in Abbildung 4.6 dargestellt. Die Geschwindigkeiten  $U_i$  bezeichnen die Grobgittergeschwindigkeiten,  $u_i$  die Feingittergeschwindigkeiten. In dieser Darstellung sind nur die Zellen des Grobgitters dargestellt.

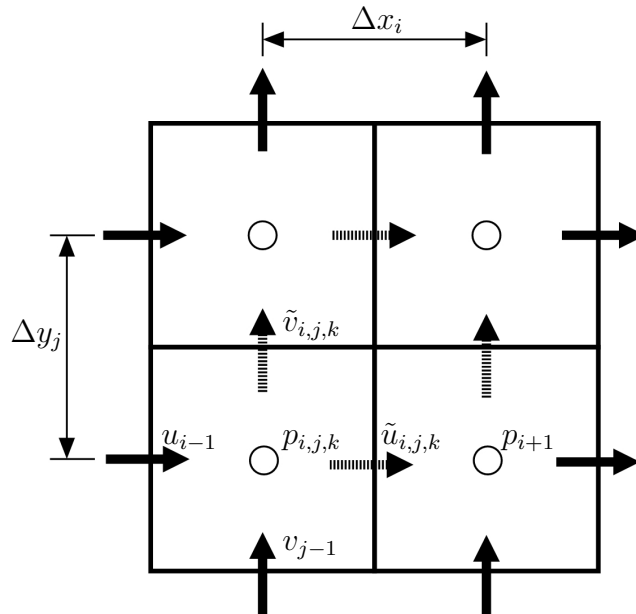
Zur Bestimmung der Geschwindigkeiten auf dem Feingitter werden folgende Bedingungen formuliert: i) der Fluss über die Fläche auf grobem und feinem Gitter muss identisch sein

$$U_i \frac{1}{2} (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) = \frac{1}{2} (\Delta x_{i-1} u_{i-0.5} + \Delta x_i u_{i+0.5}), \quad (4.20)$$

und ii) der Gradient auf beiden Gittern soll mit zweiter Ordnung übereinstimmen

$$\frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i} = 4 \frac{u_{i+0.5} - u_{i-0.5}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}. \quad (4.21)$$

In der versetzten Variablenanordnung von MGLET ist die Zellgröße einer Feingitterzelle genau halb so groß wie der Abstand zweier Grobgittergeschwindigkeiten und die Geschwindigkeiten auf dem Feingitter sind genau in der Mitte der Zellfläche des feinen Gitters definiert. Mit Hilfe beider Gleichungen lassen sich die Feingittergeschwindigkeiten, die sich in der gleichen Fläche wie die Grobgittergeschwindigkeiten befinden, bestimmen. Sukzessive angewandt auf die drei Geschwindigkeitskomponenten erhält man alle Feingittergeschwindigkeiten auf den Oberflächen der Grobgitterzellen. Diese sind divergenzfrei und ergeben die gleichen Flüsse wie auf dem Grobgitter. Betrachtet man nun eine Zelle auf dem groben Gitter und die daraus entstandenen acht Feingitterzellen, so gibt es noch zwölf unbekannte Feingittergeschwindigkeiten im Inneren der Grobgitterzelle.



**Abbildung 4.7:** Schematische Darstellung der divergenzfreien Geschwindigkeiten aus dem ersten Interpolationsschritt (schwarz) und den Geschwindigkeiten des zweiten Interpolationsschritts (gestrichelt)



Für zwei Dimensionen ist dies in Abbildung 4.7 skizziert. Die Verfeinerung einer Grobzelle erzeugt im zwei dimensional vier Feingitterzellen (acht im drei dimensional). Die schwarz dargestellten Feingittergeschwindigkeiten sind durch die oben entwickelte Interpolation bestimmt, befinden sich mit den Grobgittergeschwindigkeiten (nicht dargestellt) auf der selben Fläche und sind divergenzfrei. Die gestrichelt dargestellten Geschwindigkeitskomponenten müssen noch bestimmt werden. Dazu werden sie in einem ersten Schritt mit einer zentralen Interpolation zweiter Ordnung geschätzt und, da diese geschätzten Geschwindigkeiten im Allgemeinen die Massenerhaltung nicht erfüllen, mit einer Druckkorrektur korrigiert. Die Druckkorrektur wird direkt für jeweils acht Feingitterzellen, die aus einer Grobgitterzelle entstanden sind, gelöst. Für diese acht Zellen wird die Poisson Gleichung aufgestellt. Die Geschwindigkeiten auf der Oberfläche der Grobgitterzelle dürfen durch die Druckkorrektur nicht verändert werden, da diese schon divergenzfrei sind. Für die Poisson Gleichung ergibt dies eine Neumann Randbedingung für den Druck. In einer diskreten Formulierung zweiter Ordnung ergibt dies

$$A\vec{p} = \vec{d}. \quad (4.22)$$

$\vec{d}$  ist die Divergenz der Zelle

$$d_{i,j,k} = \frac{\tilde{u}_{i,j,k} - u_{i-1,j,k}}{\Delta dz_i} + \frac{\tilde{v}_{i,j,k} - v_{i,j-1,k}}{\Delta dy_j} + \frac{\tilde{w}_{i,j,k} - w_{i,j,k-1}}{\Delta dz_k}, \quad (4.23)$$

$\vec{p} = p_{i,j,k}$  der zu bestimmende Druck und  $\Delta dx_i = 0.5(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})$  die entsprechende Zellgröße. In obiger Gleichung wurde angenommen, dass der Index  $i, j, k$  die erste Zelle in kartesischer Betrachtung beschreibt. Damit sind die Geschwindigkeiten  $\tilde{u}_{i,j,k}$  die Divergenz behafteten Geschwindigkeiten, die durch die zentrale Differenz zweiter Ordnung geschätzt wurden, und  $u_{i-1,j,k}$  die divergenzfreien Geschwindigkeiten auf der Oberfläche der Grobgitterzelle. Die Matrix A enthält die Koeffizienten für die zweite Ableitung des Drucks samt Randbedingungen. Beispielfhaft für die Zelle  $i, j, k$  ergibt sich folgende diskrete Poissongleichung

$$\frac{(p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k})}{\Delta dx_i \Delta x_{i-1}} + \frac{(p_{i,j+1,k} - p_{i,j,k})}{\Delta dy_j \Delta y_{j-1}} + \frac{(p_{i,j,k+1} - p_{i,j,k})}{\Delta dz_k \Delta z_{k-1}} = d_{i,j,k}, \quad (4.24)$$

aus welcher sich die Koeffizienten der Matrix A herauslesen lassen. Man erhält ein System aus acht Gleichungen und acht Unbekannten das nicht linear unabhängig ist. Da nur die Druckgradienten für die Korrektur entscheidend sind, kann ein Druckwert zu Null gesetzt werden. Das daraus resultierende  $7 \times 7$  System kann durch eine direkte Invertierung der

Matrix  $A$  gelöst werden:

$$\vec{p} = A^{-1} \vec{d}. \quad (4.25)$$

Da die Koeffizientenmatrix  $A$  nur von Geometriefaktoren abhängt, kann die Invertierung einmal vor Beginn der Simulation durchgeführt und für die weitere Berechnung abgespeichert werden, was das Lösen dieser Poisson Gleichung sehr effizient macht. Mit den resultierenden Druckwerten für die acht Feingitterzellen wird eine Korrektur der Geschwindigkeiten durchgeführt.

$$u_{i,j,k} = \tilde{u}_{i,j,k} - \frac{p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}}{\Delta x_i}. \quad (4.26)$$

Durch dieses Verfahren wird die Divergenzfreiheit der Geschwindigkeiten auf dem Feingitter gewährleistet.

Im Vergleich zu einer DNS der Strömung auf dem Feingitter ist dieses Verfahren um den Faktor  $\approx 7$  schneller. Eine Analyse der Genauigkeit des Verfahrens wird zusammen mit den Ergebnissen der DNS der turbulenten Kanalströmung in Kapitel (5) präsentiert.

## 4.4 Auswertung von gefilterten und subfilter Größen entlang Lagrange'scher Bahnen

Für die Untersuchung der Mischmodellierung in Kapitel (7.1.2) wird der Verlauf mehrerer Größen, wie z. B. der Konzentration  $\Phi$  oder der skalaren Dissipationsrate  $\epsilon_\Phi$ , entlang Lagrange'schen Bahnen bzw. auf Fluidballen benötigt<sup>6</sup>. Der Fluidballen bewegt sich immer mit der lokalen Geschwindigkeit

$$\frac{dX_i^+(t, \vec{Y})}{dt} = u_i^+(X^+, t), \quad (4.27)$$

mit  $\vec{X}^+(t, \vec{Y})$  als aktuelle Position des Fluidballens und  $\vec{Y}$  als Startposition. Die mit  $+$  indizierten Größen bezeichnen Größen auf der Lagrange Bahn. Gleichung (4.27) wird mit einer expliziten Euler Methode in der Zeit integriert. Die Geschwindigkeiten  $u_i^+(X^+, t)$ , sowie auch alle anderen zur Auswertung benötigten Größen werden mit einer Lagrange Interpolation vierter Ordnung vom Eulergitter auf die Partikelpositionen interpoliert [36]. Da diese Auswertung nur "passiv" ist, d. h. nur Stichproben entlang von Lagrange'schen Bahnen gezogen werden, ist zum einen die Genauigkeit des Zeitintegrationsverfahren ausreichend und zum

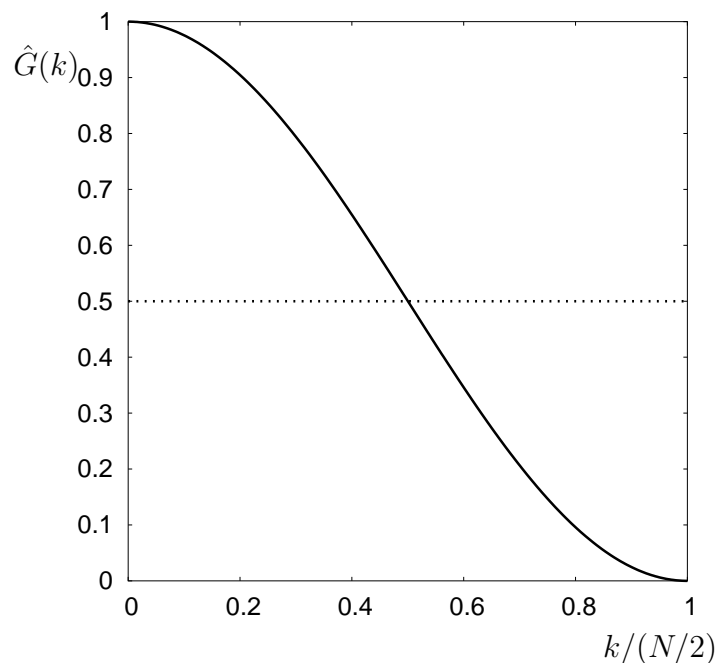
<sup>6</sup>Der Fluidballen kann auch als masseloses Partikel angesehen werden

anderen eine höhere Ordnung der Interpolationsmethode für glatte Zeitverläufe entscheidend. Die Divergenzfreiheit der Interpolation der Geschwindigkeiten auf die Partikelpositionen (vgl. Jenny et al. [40]) ist hier nicht von Nöten.

Zusätzlich bedarf die Analyse der Mischmodellierung eine Aufspaltung von mehreren DNS-Größen in aufgelösten Anteil und nicht aufgelösten Anteil. Dies geschieht mittels einer Filterung der Größe  $Q(\Phi)$ . Hierzu wird ein expliziter Filter

$$\begin{aligned} \overline{Q(\Phi(x_i, t))} &= \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Phi(x_i - r, t))G(r)dr = \\ &\alpha_{-1}Q(\Phi(x_{i-1}, t)) + \alpha_0Q(\Phi(x_i, t)) + \alpha_{+1}Q(\Phi(x_{i+1}, t)) , \end{aligned} \quad (4.28)$$

mit  $\alpha_{\pm 1} = 1/4$  und  $\alpha_0 = 1/2$  verwendet. Dies ist der Top-Hat Filter mit der Filterweite  $2\Delta x$  und entspricht genau der in Kapitel (4.2.1) eingeführten Filterung mit der Trapezregel. Die Transferfunktion  $\hat{G}(k)$  im Spektralraum ist in Abbildung 4.8 dargestellt.



**Abbildung 4.8:** Filtertransferfunktionen der Filteroperationen (4.28)  $k/(N/2) = 1$  entspricht der maximalen, auf dem Gitter darstellbaren Wellenzahl.

Die Transferfunktion ist bei  $k/(N/2) = 0.5$ , was einer Wellenlänge von  $4\Delta x$  entspricht, auf 0.5 abgefallen. Diese Wellenzahl wird für diesen Filter als Grenze zwischen aufgelösten und

nicht aufgelösten Skalen betrachtet. Die subfilter Fluktuationen werden dann mit

$$Q'(\Phi) = Q(\Phi) - \overline{Q}(\Phi) \tag{4.29}$$

berechnet. Ein spektraler Filter würde eine sauberere Trennung zwischen den aufgelösten und nicht aufgelösten Skalen zulassen, ist aber aufgrund der Anwendung für parallele Rechnungen mit Gebietszerlegung und nicht periodischen Randbedingungen in wandnormaler Richtung nicht praktikabel. Für die Berechnung der aufgelösten und nicht aufgelösten Anteile für die unterschiedlichen  $Sc$  bei den verschiedenen Gittern wurde die Filteroperation (4.28) mehrfach angewandt, mit dem Ziel eine vergleichbare Transferfunktion für alle Gitter zu erreichen und dementsprechend den gleichen Anteil den aufgelösten Skalen zuzuschlagen. Eine genaue Beschreibung folgt in Kapitel (7.1.2).

# 5 Direkte Numerische Simulation des passiven Skalartransports in turbulenter Kanalströmung bei hohen Schmidt Zahlen

Die Direkte Numerische Simulation (DNS) kann Aufgrund immer leistungsfähigerer Rechner, vor allem bei niedrigen Reynoldszahlen, vermehrt für die Untersuchung und Analyse turbulenter Strömungen eingesetzt werden [35, 37, 38]. Durch die Zugänglichkeit der kompletten Information der untersuchten Strömung ist die DNS eine geeignete Methode für die Generierung von Referenzdaten, die Modellentwicklung und die Turbulenzforschung. Die DNS löst alle Längen- und Zeitskalen auf, was für turbulente Strömungen bedeutet, dass sowohl das integrale Längenmaß  $l_0$  als auch das Kolmogorov'sche Mikromaß  $\eta_K$  aufgelöst werden müssen. Das Verhältnis zwischen diesen beiden Skalen (siehe Kapitel 2.3) beträgt  $l_0/\eta_K = Re^{3/4}$ , was bedeutet, dass der Rechenaufwand einer DNS mit steigender  $Re$  rasant steigt. Dieses Problem verschlimmert sich bei der Untersuchung von Vermischungsprozessen bei hohen Schmidt Zahlen, denn dort ist das kleinste, aufzulösende Längenmaß die Batchelor Länge  $\eta_B$  (siehe Kapitel 2.4) die um den Faktor  $\sqrt{Sc}$  kleiner als das Kolmogorov Längenmaß ist. Dementsprechend wurden bisher nur wenige DNS für  $Sc > 1$  durchgeführt. Die bis jetzt höchste Schmidt Zahl von  $Sc = 144$  wurde von Brethouwer et al. [6] in isotroper Turbulenz mit einem mittleren Skalargradienten erreicht. Die Gruppe um Na, Papavassiliou und Hanratty [44, 45, 48] präsentierte Ergebnisse von DNS in turbulenter Kanalströmung bei  $Re_\tau = 150$  und bis  $Sc = 10$ .

Um einen Beitrag in dieser Richtung zu leisten und um Daten für die a priori Analyse des DNS-FDF Ansatzes und der Mikromischmodellierung zu erzeugen, wurden im Rahmen dieser Arbeit mehrere DNS einer turbulenten Kanalströmung bei  $Re_\tau = 180$  und für die Schmidt Zahlen  $Sc = 3, 10, 25$  und  $49$  durchgeführt. Die Durchführung der Simulationen selbst sowie die Analyse der Strömung und der Vermischung werden im folgenden Kapitel dargelegt. Die a priori Analyse der Mischmodellierung wird in Kapitel 7 ausgeführt.

## 5.1 Numerische Parameter

Für die Simulationen wurde der in Kapitel 4 beschriebene Strömungslöser MGLET mit der Rekonstruktions-Methode sowie der hierarchischen Gitterstruktur verwendet. Alle Si-

mulationen beschreiben eine Kanalströmung zwischen zwei unendlich ausgedehnten, glatten Wänden mit dem Wandabstand  $2h$ . Die unendliche Ausdehnung in die Hauptstromrichtung ( $x$ ) sowie in die spannweite ( $y$ ) Richtung sorgt für Homogenität in diese Richtungen und kann daher mit einer endlichen Gebietslänge und periodischen Randbedingungen simuliert werden. Um den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten wurde im Vergleich zu anderen Simulation [26, 44] die Ausdehnung des Rechengebietes auf ( $L_x = 6.4h, L_y = 3.2h, L_z = 2h$ ) reduziert, und entspricht damit der gleichen Ausdehnung wie bei Kawamura et al. ([25]). In allen Fällen ist die Strömung durch einen konstanten Druckgradienten getrieben und die Turbulenz ist voll entwickelt. Die Reynolds Zahl beträgt  $Re_\tau = 180$ , gebildet mit der Schubspannungsgeschwindigkeit  $u_\tau$ , der halben Kanalhöhe  $h$  und der kinematischen Viskosität  $\nu$ . An den Wänden herrscht die Haftbedingung für die Geschwindigkeiten, wobei der Skalar an der unteren Wand konstant auf  $\Phi(x, y, 0) = 1.0$  und an der oberen Wand auf  $\Phi(x, y, 2h) = -1.0$  gehalten wird. Dadurch bildet sich in wandnormaler Richtung ein mittlerer Skalargradient aus.

**Tabelle 5.1:** Parameter der Gitter für die Simulationen.

Gitter	A	B	C	D
$Sc$	3	10	25	49
Auflösung Skalar	480x200x256	720x300x384	1200x520x640	1680x672x896
$\Delta x^+$ Skalar	2.4	1.6	0.96	0.68
$\Delta y^+$ Skalar	2.88	1.92	1.1	0.85
$\Delta z^+$ Skalar	0.67-2.49	0.45-1.67	0.25-1.05	0.18-0.75
$\eta_B^+ = \frac{\eta_K}{\sqrt{Sc}} (z^+ = 10)$	0.983	0.538	0.340	0.243
$\eta_B^+ (z^+ = 180)$	2.097	1.148	0.726	0.519
Auflösung Geschw.	240x100x128	360x150x192	600x260x320	840x336x448
$\Delta x^+$ Geschw.	4.8	3.2	1.92	1.37
$\Delta y^+$ Geschw.	5.76	3.84	2.2	1.7
$\Delta z^+$ Geschw.	1.35-4.98	0.9-3.34	0.50-2.1	0.36-1.5
Stichproben t $\nu/u_b^2$	6117	8743	2513	2734
Anzahl der Stichp.	3314	2526	1815	1481

Um die erforderliche Auflösung für die einzelnen Simulationen zu bestimmen, wurde wie folgt vorgegangen. Zuerst wurde die benötigte Auflösung mittels einer Gitterstudie bei  $Sc = 3$  ermittelt. Dafür wurde zuerst ein Gitter gewählt, das das Batchelor Längenmaß  $\eta_B = \eta_K/\sqrt{Sc}$  auflöste.  $\eta_K$  ist das Kolmogorov Längenmaß, und aus früheren Simulationen ([63]) war bekannt, dass ein Gitter mit ( $N_x = 128, N_y = 84, N_z = 128$ ) für die Strömung ausreichend ist. Daraus ergab sich ein um den Faktor  $\sqrt{Sc} \approx 2$  in jeder Richtung feineres Skalargitter. Erste Analysen zeigten kleine parasitäre Oszillationen im instantanen Skalarfeld, welche hauptsächlich daraus rührten, dass sich große Gradienten im Skalarfeld von der Wand ablösten und in die Hauptströmungsrichtung gedreht wurden. Um diese Oszillationen zu vermeiden wurde das Gitter nochmals um den Faktor 1.875 in  $x$ -Richtung und um den Faktor  $\approx 1.2$  in  $y$ -Richtung verfeinert. Dies resultierte schließlich in einer Auflösung für das Skalargitter bei  $Sc = 3$  von ( $N_x = 480, N_y = 200, N_z = 256$ ). Das Gitter für die Berechnung der Strömung bei dieser  $Sc$  ergab sich aus der hierarchischen Gitterverfeinerung durch eine Vergrößerung

um den Faktor zwei in jede Richtung. Die Feingitter für die Simulationen bei den höheren  $Sc$  ergaben sich aus der Skalierung des Strömungsgitters von  $Sc = 3$  mit  $\approx \sqrt{Sc}$ . Diese Vorgehensweise resultierte in den Berechnungsgittern welche in Tabelle (5.1) zusammengefasst sind. Für alle Simulationen wurde das CFL-Kriterium des feinen Skalargitters als Bedingung für die Zeitschrittweite benutzt. Das Strömungsgitter **A** bei  $Sc = 3$  ist ausreichend für eine DNS des Strömungsfeldes und dessen Gitterweite wird im weiteren Verlauf als Maß für das Kolmogorov Längenmaß bzw. als Maß für die Größe der dissipativen Strukturen im Strömungsfeld angesehen. Dieses Gitter wurde auch für die Simulation von  $Sc = 1$  benutzt. Für eine effiziente Erzeugung von Startfeldern für den Skalar wurden alle Fälle mit unterschiedlichen  $Sc$  zuerst auf Gitter **A** berechnet, da der Rechenaufwand auf diesem Gitter relativ gering ist und ein großer Zeitschritt verwendet werden konnte. Aus eigenen Arbeiten ([63]) war bekannt, dass mit geeignetem Feinstrukturmodell mittlere Konzentrationsfelder auch bei hohen  $Sc$  gut vorhergesagt werden können. Nachdem das Skalarfeld statistische stationär war<sup>1</sup> wurden die Geschwindigkeits- und Skalarfelder auf das  $Sc$  spezifische feine Gitter als Startlösung interpoliert. Ausgehend von dieser Lösung lief jede Simulation ungefähr  $100t^*$  Zeiten mit  $t^* = \nu/u_\tau^2$ , was ungefähr 10 kompletten Durchläufen mit  $u_b$  entspricht<sup>2</sup>, bevor die Strömung auf den feinen Gittern voll eingelaufen war und mit der Ziehung der statistischen Stichproben begonnen wurde. Die Anzahl der Stichproben für die Bildung von Statistiken erster und zweiter Ordnung und die damit verbundene Simulationsdauer sind in Tabelle 5.1 angegeben.

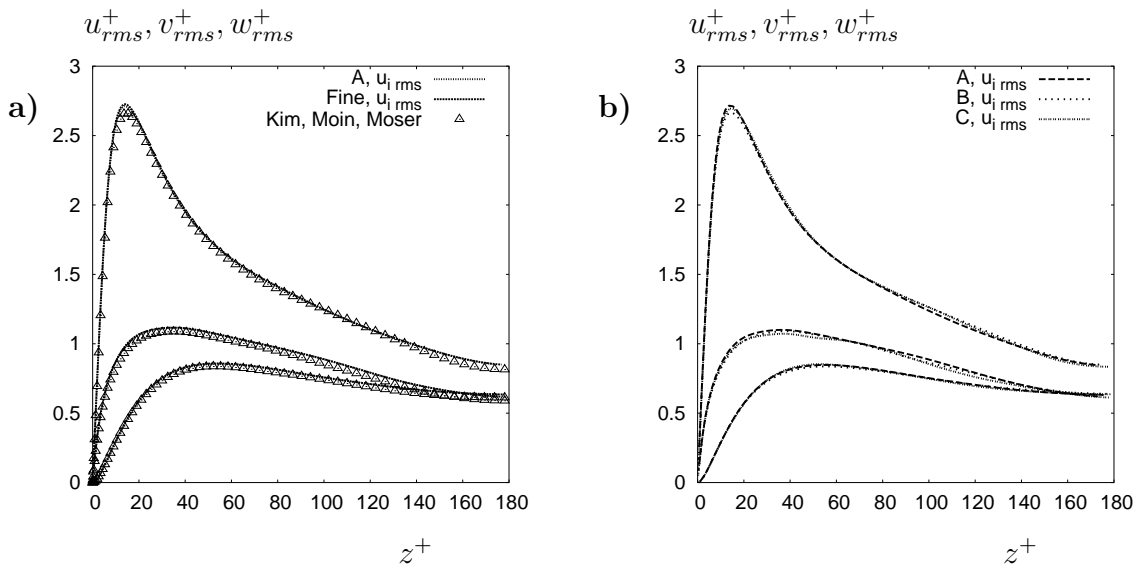
## 5.2 Validierung

Um die ausreichende Auflösung der Strömung bei Gitter **A** zu demonstrieren zeigt Abbildung 5.1a einen Vergleich der rms Werte der Geschwindigkeiten mit Referenzdaten von Kim et al. [26]. Zusätzlich sind die rms Werte abgebildet, welche aus den interpolierten Geschwindigkeiten des Feingitters von **A** gebildet wurden. Die sehr gute Übereinstimmung zeigt dass die Auflösung des Grobgitters auf Gitter **A** für eine DNS der Strömung ausreichend ist und dass die in Kapitel 4.3 entwickelte Interpolation für das hierarchische Gitter die Geschwindigkeiten ohne erkennbaren Fehler auf das Feingitter projiziert. Abbildung 5.1b zeigt die rms Werte der Geschwindigkeiten auf den Gittern **A** mit **C**. Die kleinen Unterschiede sind allenfalls durch die Statistik verursacht, was wiederum zeigt dass die Auflösung von Gitter **A** für eine DNS der Strömung adäquat ist.

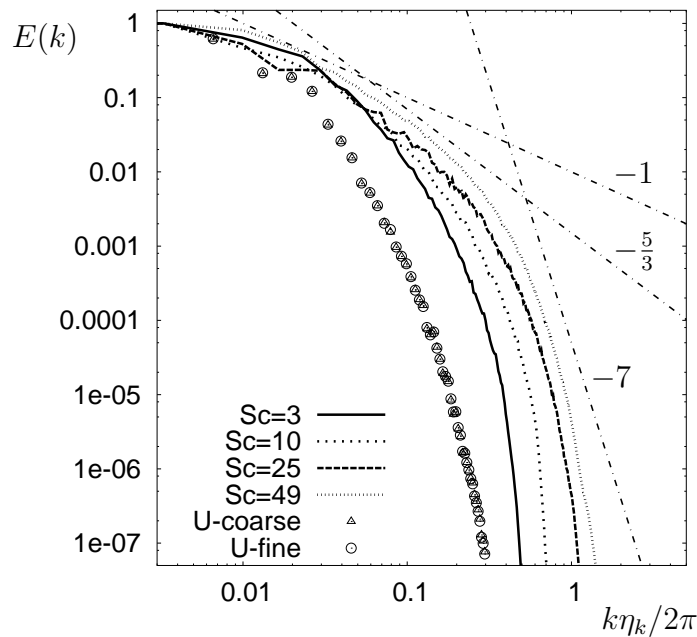
Das eindimensionale Energiespektrum der  $u$ -Geschwindigkeit (Symbole) sowie der skalaren Energie bei verschiedenen  $Sc$  in Hauptströmungsrichtung in der Kanalmitte ist in Abbildung 5.2 zu sehen. Das Geschwindigkeitsspektrum stammt von der Simulation auf Gitter **B** aus den Grob- und Feingittergeschwindigkeiten. In den auf dem Grobgitter repräsentierten Wellenzahlen erzeugt die Interpolation keinerlei Rauschen oder Abweichungen und beide Spektren sind identisch. Die Spektren des Skalars bei verschiedenen  $Sc$  zeigen ein Ansteigen der Energie bei hohen Wellenzahlen mit zunehmender  $Sc$ . Die dissipativen Strukturen

<sup>1</sup>Das mittlere Skalarfeld zeigte von Lauf zu Lauf keine Veränderung mehr

<sup>2</sup> $u_b$  ist definiert als  $u_b = \frac{1}{h} \int_0^{2h} \langle u(z) \rangle dz$



**Abbildung 5.1:** (a): Vergleich der rms Werte der Geschwindigkeiten zwischen Grob- und Feingitter und Referenzdaten von Kim et al. [26]; (b): Vergleich der rms Werte zwischen den Gittern A mit D.



**Abbildung 5.2:** Eindimensionales skalares Energiespektrum (Linien) und eindimensionales Energiespektrum der  $u$ -Geschwindigkeitskomponente (Symbole) in Hauptströmungsrichtung bei  $z^+ = 180$ , normalisiert mit den Kolmogorov Skalen und der Amplitude der ersten Mode.

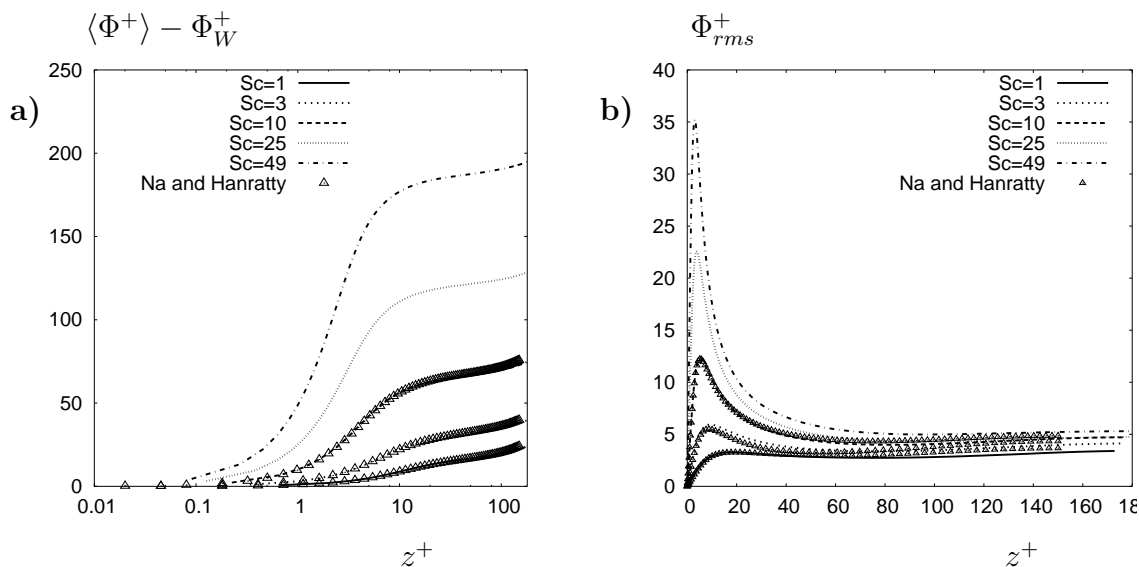
sind größer als das Batchelor Längenmaß, es gibt keinen Aufstau skalarer Energie bei hohen Wellenzahlen und die Energie fällt im dargestellten Bereich sieben Größenordnungen ab. Dies zeigt, dass alle Rechnungen gut aufgelöst sind. Aufgrund der niedrigen Reynolds Zahl ist kein ausgeprägter Inertialbereich vorhanden. Daher kann auch nicht erwartet werden,



dass bei dieser Reynolds Zahl im viskos-konvektiven Bereich das skalare Energiespektrum mit  $k^{-1}$  abfällt. Abbildung 5.2 zeigt vielmehr einen glatten und stetigen Übergang zwischen energietragenden Strukturen und dem dissipativem Bereich.

### 5.3 Statistiken erster und zweiter Ordnung

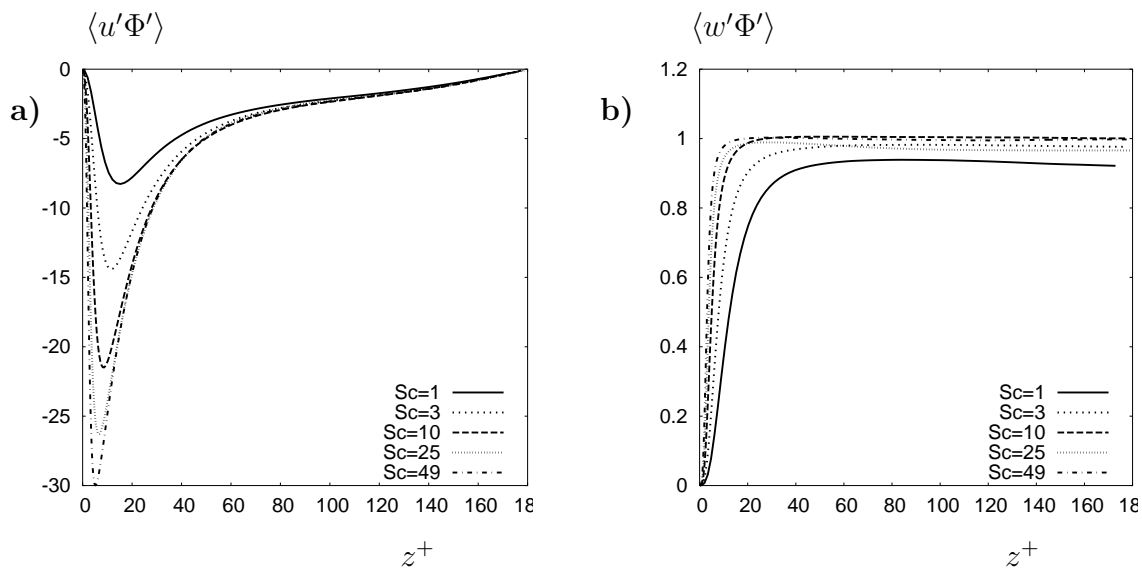
Abbildung 5.3 zeigt den mittleren Skalarverlauf (a) und die rms Werte des Skalars (b) für  $Sc = 1 - 49$ . Die Daten sind in inneren Koordinaten  $\Phi^+ = \Phi/\Phi_\tau$  dargestellt mit  $\Phi_\tau = (\frac{\Gamma}{u_\tau} \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial z})$ . Die Abbildungen zeigen auch den Vergleich mit den Ergebnissen von Na [43–45] (Symbole). Obwohl die Simulationen von Na bei  $Re_\tau = 150$  durchgeführt wurden, sind die Profile des Mittelwerts sehr ähnlich. Auch zeigen sich die gleichen Trends in den Verläufen der Konzentrationsfluktuationen: mit steigender  $Sc$  tritt das Maximum der Fluktuationen deutlicher hervor, wird größer und rückt näher zur Wand. Diese Tendenz wurde auch von Kawamura et al. ([25]) für eine gleichmäßig, von beiden Seiten beheizte Kanalströmung bei  $Re_\tau = 180$  und  $Sc = 0.02$  bis  $Sc = 5$  beobachtet.



**Abbildung 5.3:** (a): Vergleich der mittleren Skalarprofile (b): Vergleich der rms Werte des Skalars bei verschiedenen  $Sc$ .

In Abbildung 5.4 sind die turbulenten Massenströme  $\langle u'\Phi' \rangle / (u_\tau \Phi_\tau)$  sowie  $\langle w'\Phi' \rangle / (u_\tau \Phi_\tau)$  dargestellt. Bei dem wandparallelen Massenstrom zeigt sich auch hier, dass sich das Maximum mit steigender  $Sc$  stärker ausprägt und näher zur Wand rückt. Der wandnormale turbulente Massenstrom nähert sich in der Kanalmitte mit steigender  $Sc$  dem totalen Massenstrom an. Der totale Massenstrom ist die Summe aus diffusivem und turbulentem Massenstrom und entspricht dem Massenstrom der über die Wand zugeführt wird:

$$\Gamma \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial z} \Big|_W = \Gamma \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial z} - \langle w'\Phi' \rangle . \quad (5.1)$$



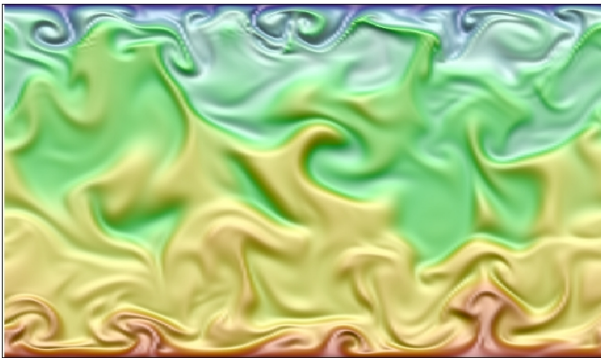
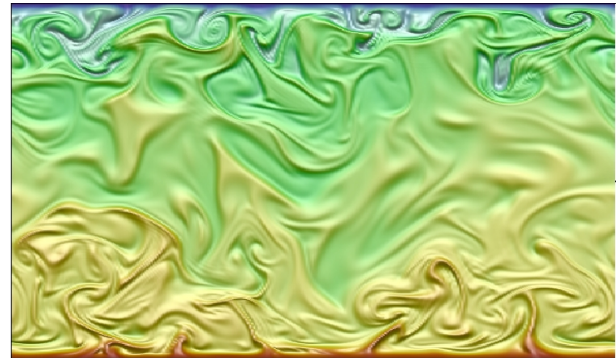
**Abbildung 5.4:** (a): turbulenter Massenstrom  $\langle u'\Phi' \rangle$  bei verschiedenen  $Sc$  (b): turbulenter Massenstrom  $\langle w'\Phi' \rangle$  bei verschiedenen  $Sc$ .

Dies zeigt, dass der diffusive Anteil am gesamten Massenstrom mit steigender  $Sc$  in der Kanalmitte abnimmt, was zum einen an der Abnahme der Diffusivität  $\Gamma$  sowie an der Abnahme des mittleren Gradienten  $\frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial z}$  liegt. Die diffusive Unterschicht, also die Schicht in welcher der diffusive wandnormale Massentransport dominiert, wird mit steigender  $Sc$  dünner. Die Statistik des wandnormalen turbulenten Massentransportes konvergiert im Inneren des Kanals sehr langsam. Bei  $Sc = 25$  wird deutlich, dass die Statistik noch nicht vollständig eingelaufen ist, da dort in der Kanalmitte die Werte für den wandnormalen Massentransport geringer sind als bei  $Sc = 3$ . Dass dies nur ein statistischer Fehler ist, zeigen die sehr guten Übereinstimmungen mit den Simulationen von Bergant und Tiselj ([5]) bei  $Sc = 25$ .

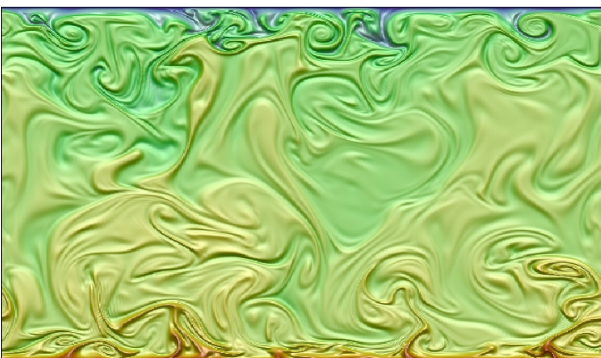
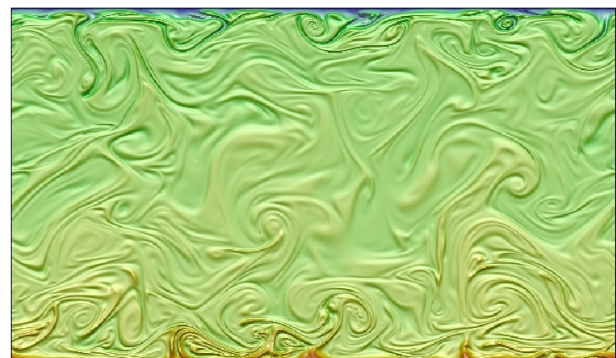
## 5.4 Instantane Skalarfelder

Die Abbildungen 5.5 und 5.6 zeigen instantane Skalarfelder normal zur Hauptströmungsrichtung, also in der  $x-y$  Ebene, Abbildung 5.7 zeigt instantane Skalarfelder normal zur spannweiten Richtung, also in der  $x-z$  Ebene, jeweils bei den vier unterschiedlichen  $Sc$ . In den Abbildungen ist der Skalar in Falschfarben dargestellt, wobei rot  $\Phi = 1.0$  und blau  $\Phi = -1.0$  repräsentiert. Es ist sehr deutlich zu erkennen, wie die Strukturen im Skalarfeld bei steigender  $Sc$  kleiner und die Gradienten steiler werden. Die Dicke der diffusiven Unterschicht des Skalarfeldes nimmt mit steigender  $Sc$  ab und dementsprechend nimmt der Gradient des Skalarfeldes an der Wand zu. Diese Beobachtung ist auch im mittleren Skalarfeld (Abbildung 5.3a) zu erkennen. Bei allen  $Sc$  sind, besonders in den Abbildungen 5.5 und 5.6 so genannte "Ejections" zu sehen. Diese Strukturen transportieren langsames, wandnahes Fluid und damit auch wandnahes, unvermishtes Skalar in Richtung Mitte des Kanals.

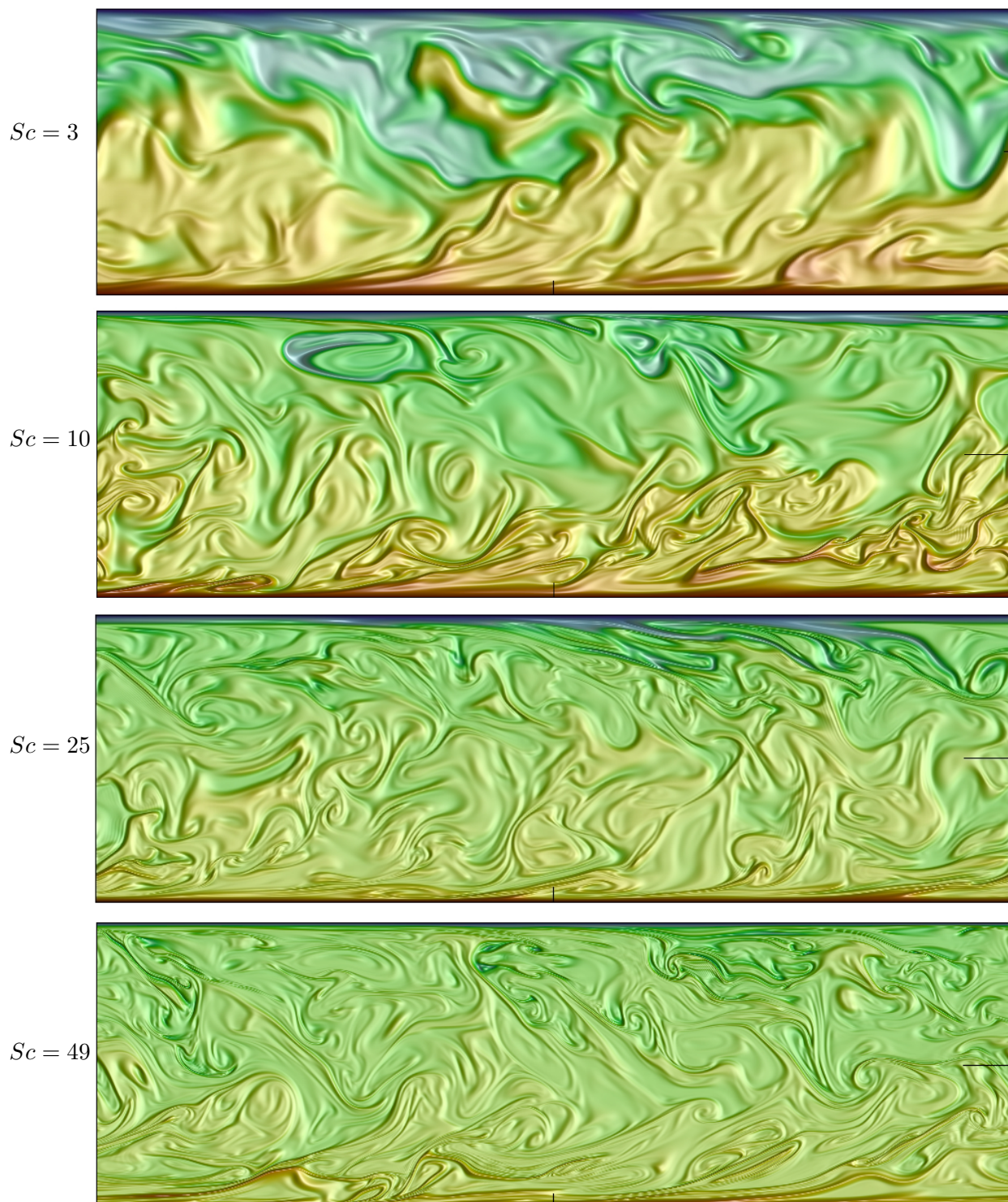
Aufgrund der dünneren diffusiven Unterschicht bei den höheren  $Sc$  werden diese Ereignisse kleiner bzw. dünner und transportieren nach dem visuellen Eindruck weniger Masse zur Kanalmitte. Im mittleren Skalarfeld führt dies zu einer Reduzierung des Skalargradienten im Inneren der Kanalströmung. Wie der nächste Abschnitt erläutert führt die Verringerung des mittleren Skalargradienten zu einer Abnahme der Produktion von skalarer Varianz im Kanalinneren und der Einfluss des turbulenten Transports nimmt daher mit steigender  $Sc$  zu. Die "Ejections" gehen in Richtung Kanalmitte in pilzartige Wirbelstrukturen über. Das Aufrollen dieser Wirbelstrukturen ist bei höherer  $Sc$  deutlicher zu sehen, und führt zu einer weiteren Vergrößerung der Gradienten im instantanen Skalarfeld. Die instantanen Bilder in der  $x$ - $z$  Ebene zeigen nahe der Wand langezogene Strukturen im Skalarfeld, so genannte "streaks" [51], die sich dann in einer "Ejection" von der Wand ablösen. Weiter in der Kanalmitte zeigt sich mit steigender  $Sc$  eine deutliche Ausrichtung der instantanen Gradienten im Skalarfeld auf  $45^\circ$  zur Wand. Auch sind hier die pilzartigen Wirbelstrukturen zu erkennen.

 $Sc = 3$  $Sc = 10$ 

**Abbildung 5.5:** Instantanes Skalarfeld in der  $y$ - $z$ -Ebene

 $Sc = 25$  $Sc = 49$ 

**Abbildung 5.6:** Instantanes Skalarfeld in der  $y$ - $z$ -Ebene



**Abbildung 5.7:** Instantanes Skalarfeld in der  $x$ - $z$ -Ebene

## 5.5 Bilanzierung der skalaren Varianz

Die Transportgleichung für die Varianz eines passiven Skalars in Strömungen konstanter Dichte lautet:

$$\frac{\partial \langle \Phi'^2 \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle \Phi'^2 \rangle}{\partial x_j} = -2 \langle \Phi' u'_j \rangle \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial x_j} - 2\Gamma \left\langle \left( \frac{\partial \Phi'}{\partial x_j} \right)^2 \right\rangle + \Gamma \frac{\partial^2 \langle \Phi'^2 \rangle}{\partial x_j^2} - \frac{\partial \langle u'_j \Phi'^2 \rangle}{\partial x_j}. \quad (5.2)$$

In der hier untersuchten, voll entwickelten turbulenten Kanalströmung mit homogener  $x$ - und  $y$ -Richtung ist die substantielle Änderung der skalaren Varianz gleich Null und die rechte Seite von Gleichung (5.2) vereinfacht sich. Der erste Term auf der rechten Seite ist der Produktionsterm und lautet in diesem Fall

$$P_\Phi = -2 \langle w' \Phi' \rangle \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial z}, \quad (5.3)$$

der zweite Term ist die Dissipation

$$\epsilon_\Phi = -2\Gamma \left\langle \frac{\partial \Phi'}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi'}{\partial x_j} \right\rangle, \quad (5.4)$$

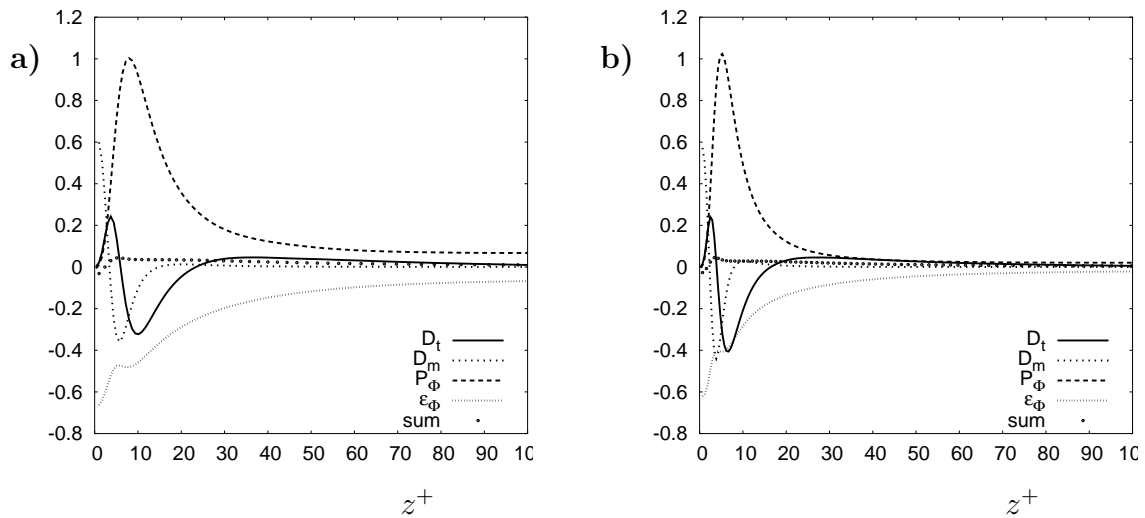
der dritte Term stellt die turbulente Diffusion dar

$$D_t = -\frac{\partial \langle w' \Phi'^2 \rangle}{\partial z} \quad (5.5)$$

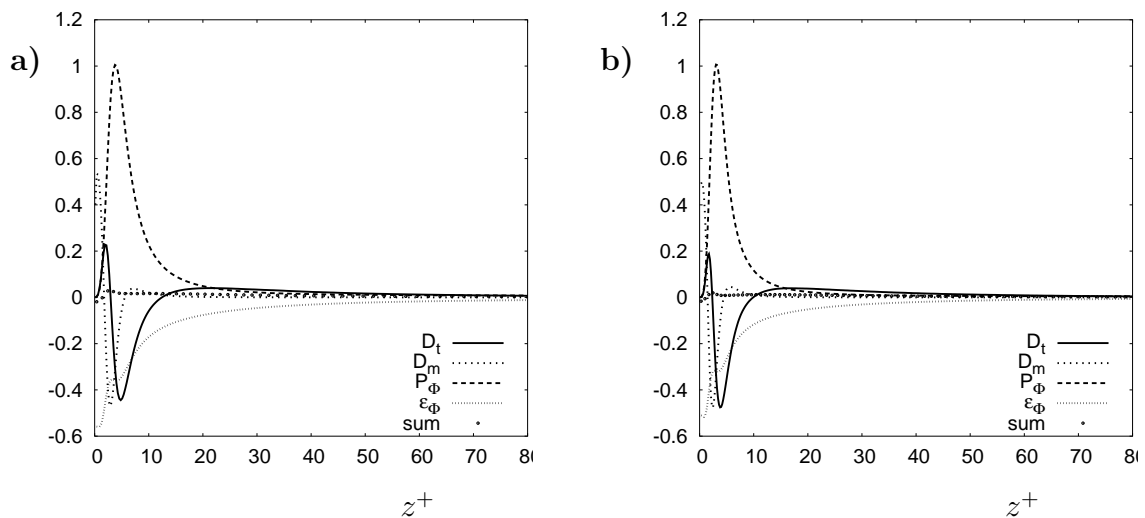
und der letzte Term auf der rechten Seite die molekulare Diffusion

$$D_m = \Gamma \frac{\partial^2 \langle \Phi' \Phi' \rangle}{\partial z^2}. \quad (5.6)$$

Die Abbildungen 5.8 und 5.9 zeigen die einzelnen Terme der Transportgleichung der skalaren Varianz (5.3) mit (5.6) für  $Sc = 3, 10, 25$  und  $49$  normiert mit  $\frac{1}{\Gamma} u_\tau^2 \Phi_\tau^2$ . Wie aus der Transportgleichung für den mittleren Skalar  $\langle \Phi \rangle$  zusammen mit Gleichung (5.3) hergeleitet werden kann, ist das Maximum der Produktion  $P_\Phi^+ = Sc/2$  für alle  $Sc$ . Mit diesem Wert



**Abbildung 5.8:** Bilanz der einzelnen Terme der Transportgleichung der skalaren Varianz, (a)  $Sc = 3$ , (b)  $Sc = 10$ .



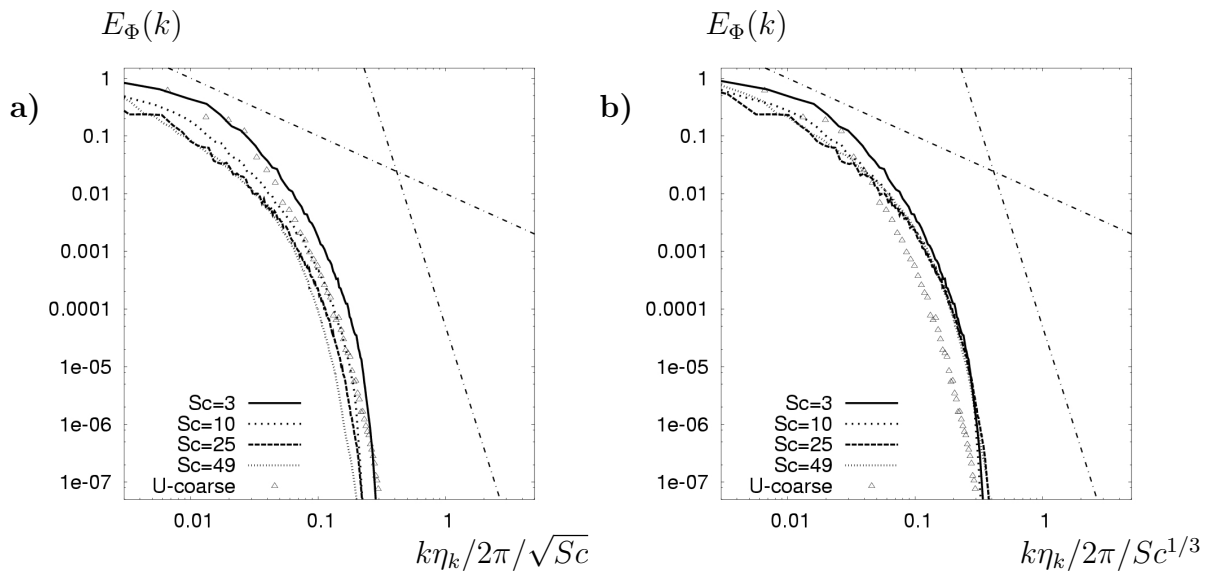
**Abbildung 5.9:** Bilanz der einzelnen Terme der Transportgleichung der skalaren Varianz, (a)  $Sc = 25$ , (b)  $Sc = 49$ .

wurden zusätzlich alle Terme aus Gleichung (5.2) normiert. Im Inneren des Kanals herrscht zwischen Produktion und Dissipation für alle  $Sc$  ein Gleichgewicht. Bei niedrigen  $Sc$  sind der molekulare und turbulente Transport im Vergleich zur Produktion und Dissipation nur nahe der Wand relevant. Bei steigender  $Sc$  ( $Sc = 10 - 49$ ) gewinnen  $D_t$  und  $D_m$  nahe der Wand an Einfluss und sind in ihrem Betrag mit der Dissipation vergleichbar. Allerdings wird dieser Bereich mit steigender  $Sc$  immer dünner. Dies wurde auch von Kawamura et al. berichtet [25]. Besonders interessant ist, dass der turbulente Transport  $D_t$  im Bereich zwischen  $15 < z^+ < 80$  bei steigender  $Sc$  an Bedeutung gewinnt und im Betrag sogar die

Produktion übersteigt ( $Sc = 25$  und  $Sc = 49$ ). Mit anderen Worten wird die skalare Varianz bei niedrigen  $Sc$  im gesamten Kanal produziert wohingegen bei hoher  $Sc$  die Produktion nahe der Wand stattfindet und dann die skalare Varianz über den turbulenten Transport in die Kanalmitte gelangt.

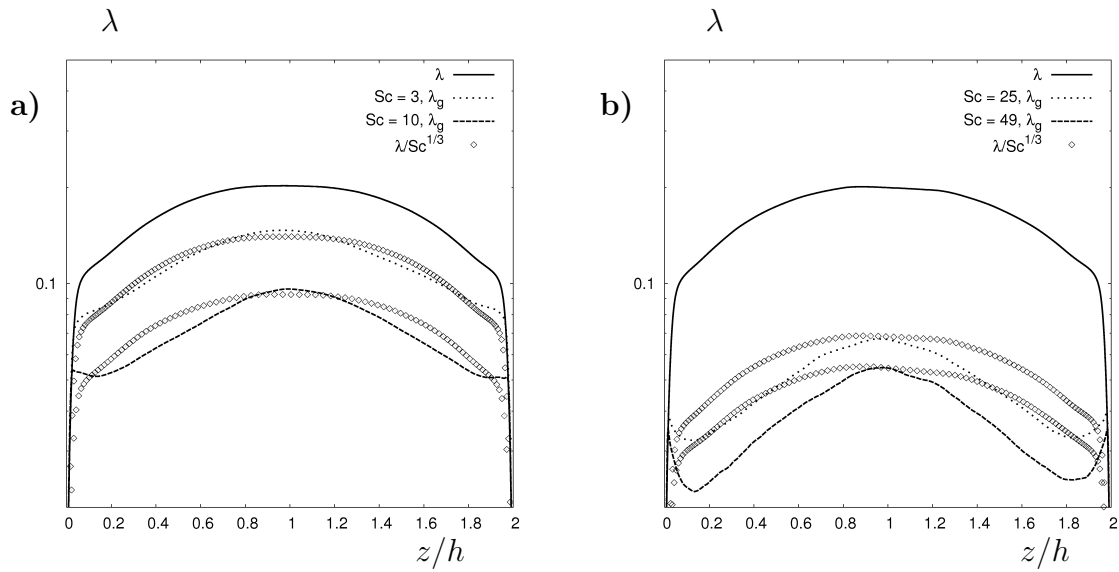
## 5.6 Längenmaße im Skalarfeld

Nach den Überlegungen von Batchelor [3] (siehe Kapitel 2.4) ist in isotropen Strömungen und bei hohen  $Re$  und  $Sc$  das kleinste skalare Längenmaß um den Faktor  $1/\sqrt{Sc}$  kleiner als das Kolmogorov Längenmaß. Im Gegensatz zu den Annahmen bei der Herleitung des Batchelor Längenmaßes ist die hier untersuchte turbulente Kanalströmung eine wandgebundene Strömung und die Reynolds Zahl ist relativ niedrig. Im folgenden Abschnitt wird das in der Strömung vorhandene skalare Längenmaß und sein Verhältnis zu den turbulenten Längenmaßen untersucht, da dieses Verhältnis die Größe des viskos-konvektiven Bereichs im Spektrum der skalaren Energie bestimmt und für die Modellierung des Mikromischens von Bedeutung ist.



**Abbildung 5.10:** Eindimensionales skalares Energiespektrum in Hauptströmungsrichtung bei  $z^+ = 180$ , normalisiert mit den Kolmogorov Skalen, der Amplitude der ersten Mode und  $\sqrt{Sc}$  (a) und  $Sc^{1/3}$  (b).

Eine Skalierung der Wellenzahlen in den Spektren des Skalars der turbulenten Kanalströmung mit  $\sqrt{Sc}$  bzw.  $Sc^{1/3}$ , wie sie in Abbildung 5.10 gezeigt ist, verdeutlicht, dass das Verhältnis von  $k_B/k_K \propto \sqrt{Sc}$  in der untersuchten Strömung nicht gegeben ist, sondern vielmehr  $k_B/k_K \propto Sc^{1/3}$  gilt. In Abbildung 5.11 ist das Taylor'sche Mikromaß als charakteristische



**Abbildung 5.11:** Taylor Mikromaß der Geschwindigkeit  $\lambda$  und des Skalars  $\lambda_g$  zusammen mit der Skalierung  $\lambda/Sc^{1/3}$  bei  $Sc = 3$  und  $Sc = 10$  (a) und  $Sc = 25$  und  $Sc = 49$  (b)

Länge für das Geschwindigkeits-  $\lambda$  bzw. Skalarfeld  $\lambda_g$

$$\lambda = \sqrt{\frac{10k\nu}{\epsilon}}, \quad \lambda_g = \sqrt{\frac{12\Gamma \langle \Phi'^2 \rangle}{\epsilon_\Phi}} \quad (5.7)$$

für die unterschiedlichen  $Sc$  abgebildet. Auch das Taylor'sche Mikromaß des Skalarfeldes skaliert in der turbulenten Kanalströmung bei dieser  $Re_\tau$  mit  $Sc^{1/3}$ . Dies ist sehr wahrscheinlich auf die niedrige Reynoldszahl in der untersuchten Kanalströmung zurückzuführen, da bei  $Re_\tau = 180$  der Inertialbereich kaum entwickelt ist und die Spektren des Skalars noch keinen  $k^{-1}$  Verlauf zeigen. Die turbulente Kanalströmung zeigt also in diesem  $Re$ - $Sc$  Bereich keine Batchelor Skalierung des Skalarfeldes. Da die Gitterauflösung mit  $1/\sqrt{Sc}$  relativ zum  $Sc = 3$  Gitter bestimmt wurde, ist für diese Beobachtung eine auflösungsbedingte Ursache auszuschließen, da sich die Auflösung mit steigender  $Sc$  im Verhältnis zu den kleinsten vorkommenden Skalen im Skalarfeld verbessert. Als Konsequenz sollte daher bei der Modellierung des Mikromischens, das sich bei den kleinsten Skalen im Skalarfeld abspielt, für inhomogene Strömungen eine explizite Verwendung der Batchelor Skalierung vermieden werden. Auch bei Strömungen bei hohen  $Re$  kann erwartet werden, dass bei komplexen Geometrieverhältnissen bzw. durch Wandeffekte lokal niedrige  $Re$  auftreten, so dass es möglich ist, dass lokal die Batchelor Skalierung nicht zutrifft. Im Laufe des Kapitels wird gezeigt, dass die Dicke der diffusiven Unterschicht ebenfalls mit  $\propto Sc^{-1/3}$  skaliert. In wie weit diese Skalierung das skalare Längenmaß im wandentfernten Bereich bestimmen sollte in weiteren Arbeiten untersucht werden.



## 5.7 Turbulente Schmidt Zahl und Mischzeiten

Für die Schließung des turbulenten Massenstroms in der gemittelten bzw. gefilterten skalaren Transportgleichung werden in RANS oder LES Simulationen häufig Wirbelviskositätsmodelle verwendet. Dabei wird in Analogie zum Wirbelviskositätsmodell der turbulente Massenstrom proportional dem Produkt aus mittlerem Gradienten des Skalars und einer turbulenten Diffusivität gleichgesetzt. Der Modellparameter ist dabei die turbulente Schmidt Zahl  $Sc_t = \nu_t/\Gamma_t$ . Diese wird meist als konstant  $Sc_t \approx 0.7$  [16] gesetzt. Damit wird der turbulente Massenstrom (hier z. B. für den RANS Kontext) geschlossen mit

$$\langle u'_i \Phi' \rangle = -\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \langle \Phi \rangle}{\partial x_i}. \quad (5.8)$$

Will man zusätzlich zur turbulenten Vermischung auch chemische Reaktion betrachten, so benötigt man, vor allem bei schnellen Reaktionen, nicht nur Informationen über das makroskopische, gemittelte oder gefilterte Skalarfeld, sondern auch über den molekularen Vermischungszustand, da die Reaktionsrate von den molekularen Skalen bestimmt ist [16]. Der molekulare Vermischungszustand wird durch die skalare Varianz zusammen mit der skalaren Dissipationsrate charakterisiert, so dass mindestens die Transportgleichung (3.6) (siehe Kapitel 3.2) gelöst werden muss. Für die Lösung dieser Gleichung muss die skalare Dissipationsrate bzw. Mikromischzeit (3.8) modelliert werden<sup>3</sup>. Dabei kann die Mikromischzeit mit einem Ähnlichkeitsansatz ([9, 16]) bestimmt werden,

$$\frac{\epsilon_\Phi}{\langle \Phi'^2 \rangle} = C_\Phi \frac{\epsilon}{k} \quad (5.9)$$

wobei  $k$  die turbulente kinetische Energie und  $\epsilon$  die Dissipationsrate derselben darstellt. Die Proportionalitätskonstante ist  $C_\Phi \approx 2$  und kann aus Modellen für das skalare Energiespektrum für hohe  $Re$  und  $Sc$  hergeleitet werden [16]. Eine ähnliche Größe, ein Verhältnis des skalaren zu einem turbulenten Zeitmaß<sup>4</sup>, wurde von Kawamura et al. [25] und Johanson und Wikström [23] ausgewertet

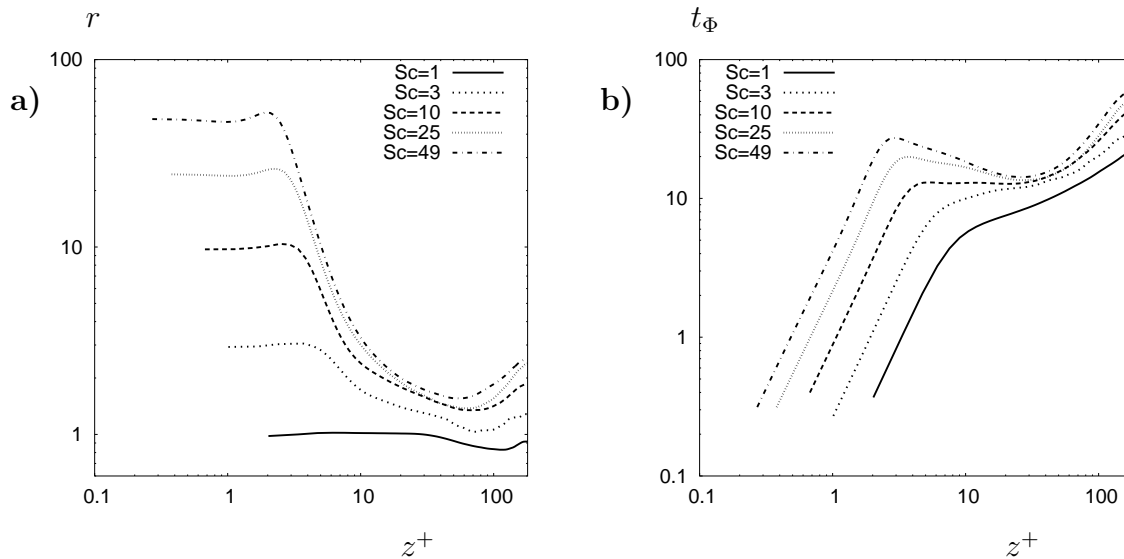
$$r = \frac{\langle \Phi'^2 \rangle}{\epsilon_\Phi} \frac{\epsilon}{2k}, \quad (5.10)$$

und entspricht genau  $r = 1/(2C_\Phi)$ . Aufgrund der wenigen verfügbaren Daten für hohe  $Sc$  konnten diese Modelle nur bei  $Sc \leq 1$  validiert werden. Aus diesem Grund ist die Analyse

<sup>3</sup>Die Mikromischzeit wird auch z. B. für die Mischfrequenz in dem weit verbreiteten LMSE Modell für das Mikromischen verwendet

<sup>4</sup>Dies entspricht genau dem halben inversen "mechanical to scalar time scale ratio" [16]

dieser Größen interessant. Beide Größen, die Mikromischzeit (3.8) und das Zeitmaßverhältnis (5.10) sind in Abbildung 5.12 in doppelt logarithmischem Maßstab gezeigt.



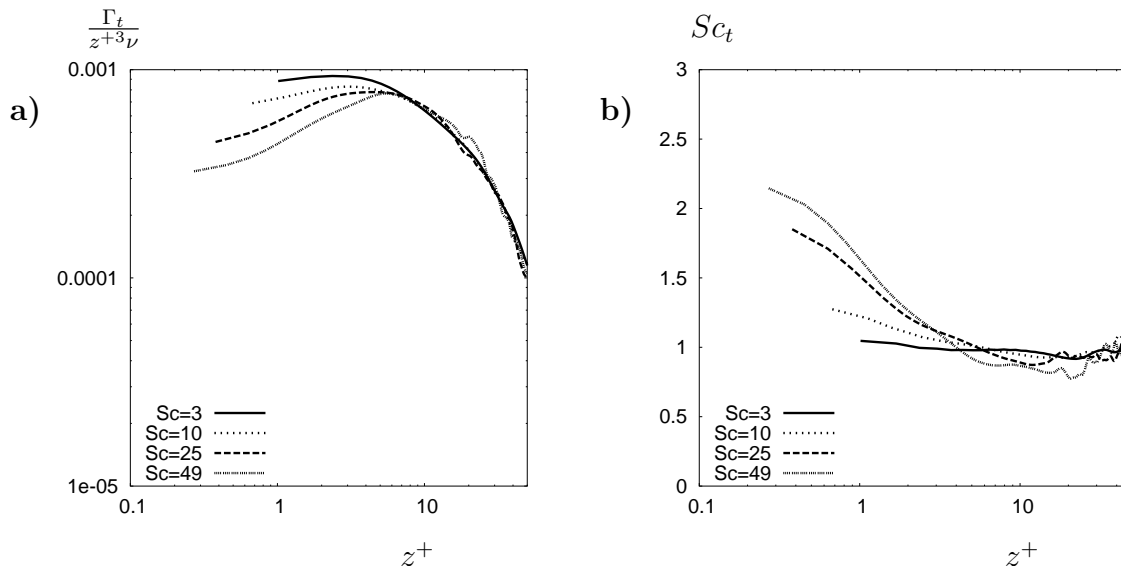
**Abbildung 5.12:** (a) Zeitmaßverhältnis (5.10) und (b) Mikromischzeit (3.8)

Das Zeitmaßverhältnis  $r$  (Abb. 5.12a) ist an der Wand gleich  $Sc$  wie von Kawamura et al. [25] beschrieben. Im gesamten Kanal erhöht es sich mit steigender Schmidt Zahl, da bei gleichbleibender  $Re_\tau$  das turbulente Zeitmaß konstant bleibt und die Mikromischzeit steigt. In der Kanalmitte werden Werte erreicht, die deutlich größer als eins sind, nämlich  $r \approx 2.53$  bei  $Sc = 49$ .  $C_\Phi$  bewegt sich bei  $Sc = 49$  damit in Bereichen zwischen  $1/100$  an der Wand und  $\approx 0.2$  in der Kanalmitte und weicht damit deutlich vom theoretisch vorhergesagten Wert  $C_\Phi = 2$  für isotrope Turbulenz bei hohen  $Re$  und  $Sc$  ab. Die Mikromischzeit (Abb. 5.12b) nimmt, da sie direkt mit dem Zeitmaßverhältnis verknüpft ist, mit steigender  $Sc$  zu. Diese Auswertung demonstriert, dass bei inhomogenen Strömungen  $r$  und damit  $C_\Phi$  sehr leicht um mehrere Größenordnungen zwischen der Wand und der Kanalmitte variieren können, abhängig von  $Sc$ . Daher können, zumindest für die hier untersuchte Reynolds Zahl, die Annahmen für die theoretische Herleitung von  $C_\Phi = 2$  nicht übernommen werden. Verglichen mit der hohen Taylor Reynolds Zahl bei der analytischen Herleitung des Zeitmaßverhältnisses für eine voll entwickelte skalares und turbulentes Spektrum im spektralen Gleichgewicht [16] ist die Taylor Reynolds Zahl in dieser Strömung sehr viel kleiner ( $Re_\lambda = 25$  in der Kanalmitte), und daher können die Abweichungen mit dieser niedrigen Reynolds Zahl erklärt werden<sup>5</sup>. Daher ist es notwendig bei Strömungen mit niedrigen, lokalen  $Re_\lambda$  eine Anpassung von  $C_\Phi$  vorzunehmen, worauf auch schon Liu und Fox [33] hingewiesen haben.

Eine weitere wichtige Modellierungsgröße ist die turbulente Schmidt Zahl  $Sc_t$  (oder auch turbulente Prandtl Zahl). Das Verhalten dieser Größe nahe der Wand wurde in der Literatur kontrovers diskutiert. Antonia und Kim ([1]) zeigen, dass sich  $Sc_t$  für  $Sc \leq 2$  an der Wand dem Wert  $\approx 1,1$  annähert. Kawamura et al. [25] bestätigt dies bis zu  $Sc = 5$ . Im Gegensatz zeigte Na et al. [45], dass die turbulente Diffusivität  $\Gamma_t$  im Limit  $z^+ \rightarrow 0$  mit steigender

<sup>5</sup>Für niedrige  $Re_\lambda$  leitet Fox  $C_\Phi$  mittels Annahmen über die Form des Spektrums her

$Sc$  abnimmt, was bei konstanter turbulenter Viskosität  $\nu_t$  zu einem Anstieg von  $Sc_t$  führt. Seki et al. [65] fanden für  $Sc \leq 2$  den selben Grenzwert wie Antonia und Kim, beobachtete allerdings einen Anstieg von  $Sc_t$  nahe der Wand bei  $Sc = 10$  und führte dies auf den kleineren Kreuzkorrelationskoeffizienten  $R_{w'\Phi'}$  zurück. Der Anstieg von  $Sc_t$  ist nur bei  $z^+ \leq 2$  sichtbar, was der Grund dafür sein könnte, dass dieser Anstieg nicht von Kawamura et al. beobachtet wurde, da seine Daten nur bis  $z^+ \geq 1$  reichen.



**Abbildung 5.13:** (a) Grenzwert der turbulenten Diffusivität an der Wand, (b) turbulente Schmidt Zahl nahe der Wand

Der Verlauf der turbulenten Diffusivität, normiert mit  $z^{+3}$  und  $\nu$  ist in Abbildung 5.13a für die verschiedenen  $Sc$  dargestellt. In Äußeren Bereich  $z^+ > 20$  liegen alle Kurven aufgrund der Normierung mit  $z^{+3}$  aufeinander. Nahe der Wand nimmt die turbulente Diffusivität mit steigender  $Sc$  ab. Die Wandabstände ab welchem die Verläufe von  $\Gamma_t$  voneinander abweichen nehmen leicht zu, wobei eine genaue Aussage auf Grund von statistischer Unsicherheit nicht möglich ist. Bei  $Sc = 10$  beginnt die Abweichung von dem Profil bei  $Sc = 3$  ungefähr bei  $z^+ = 3$ , was mit den Daten von Na et al. [45] übereinstimmt. In den hier durchgeführten Simulationen konnte der Bereich  $\Gamma_t/z^{+3} = konst.$  nicht erfasst werden, da die Dicke dieser Unterschicht bei  $Sc = 1$  kleiner als  $z^+ = 1$  ist, damit deutlich dünner als die konduktive Unterschicht ist und mit steigender  $Sc$  weiter abnimmt (vergleiche Abb. 5.14). Zusätzlich zeigt Abbildung 5.13b die Profile der turbulenten Schmidt Zahl nahe der Wand. Wie zu erwarten nimmt  $Sc_t$  aufgrund der Verringerung von  $\Gamma_t$  nahe der Wand mit steigender  $Sc$  zu. Die Werte erreichen  $Sc_t = 1,34$  bei  $Sc = 10$ , was ungefähr dem Wert von Seki et al. entspricht, und  $Sc_t = 2,15$  bei  $Sc = 49$ .

Die Auswertungen der Modellierungsgrößen  $Sc_t$  und  $C_\Phi$  in der turbulenten Kanalströmung bei  $Re_\tau = 180$  und bei den verschiedenen  $Sc$  zeigen, dass in dieser Strömung die Modellierungsgrößen von den in der Literatur beschriebenen Werten abweichen. So variiert  $C_\Phi$  um bis zu zwei Größenordnungen zwischen Wand und Kanalmitte, ist nicht unabhängig von  $Sc$  und entspricht nicht dem theoretisch vorhergesagten Wert  $C_\Phi = 2$ . Die turbulente Schmidt Zahl

ist, besonders nahe der Wand, nicht konstant und ist auch abhängig von  $Sc$ . Für die Modellierung des Mikromischens für inhomogene, wandgebundene Strömungen können die Modellparameter nicht bedingungslos übernommen werden da in komplexen Strömungsfällen lokal niedrige  $Re$  vorhanden sein können, und wie sich zeigt bei niedrigen  $Re$  die Werte der Modellparameter stark von den vorhergesagten abweichen können.

## 5.8 Stoffübergangskoeffizient

In einer voll entwickelten turbulenten Kanalströmung kann der Massenstrom durch den Kanal durch einen dimensionslosen Stoffübergangskoeffizienten  $K^+$  beschrieben werden:

$$K^+ = \frac{1}{Sc} \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z^+} \right|_W \frac{1}{\Phi_W - \Phi_C} = \frac{1}{\Delta \Phi^+}, \quad (5.11)$$

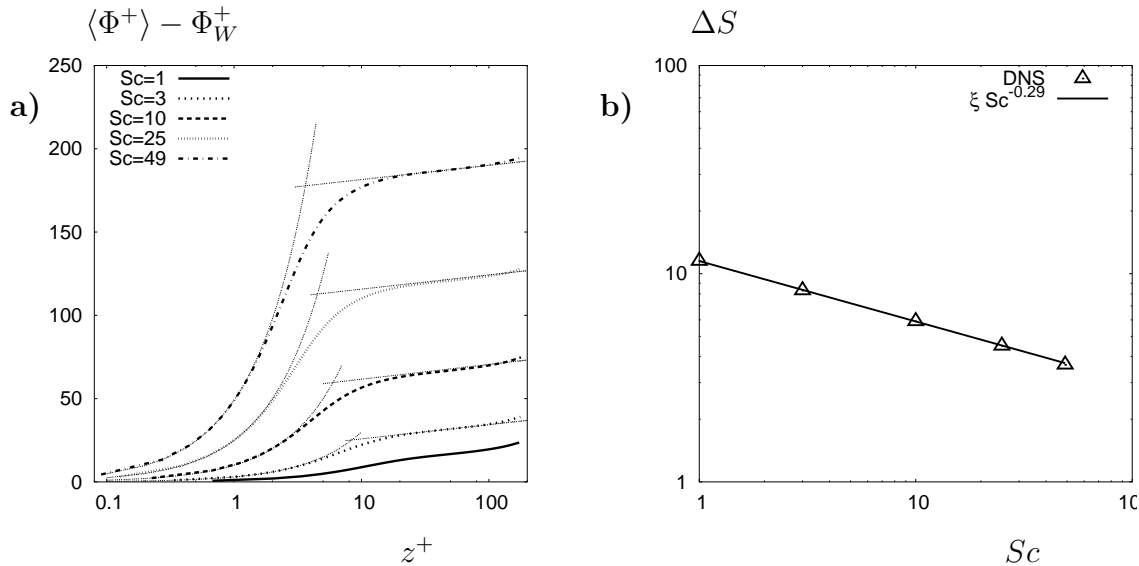
wobei  $\Phi_W$  die Konzentration an der Wand und  $\Phi_C$  die Konzentration in der Kanalmitte ist. Ist  $\Phi$  die Temperatur des Fluids so entspricht  $K^+$  der Nusseltzahl. Mit  $K^+$  lässt sich bei bekanntem  $u_\tau$  und bekanntem Konzentrationsunterschied  $\Delta \Phi = \Phi_W - \Phi_C$  der Konzentrationsfluss an der Wand  $\Gamma \left. \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right|_W$  bestimmen. Die Abhängigkeit von  $K^+$  von  $Sc$  wurde über die letzten Jahrzehnte intensiv diskutiert ([30, 42, 66]). Üblicherweise wird der Zusammenhang aufgrund der Analogie zwischen Impuls und Stofftransport mit einem Potenzgesetz beschrieben:  $K^+ = C Sc^b$ . Je nachdem welche Annahme über das Verhalten von  $\Gamma_t$  nahe der Wand getroffen wird, kann der Exponent entweder zu  $b = -2/3$  oder  $b = -3/4$  bestimmt werden. Experimentell jedoch bestimmten Shaw und Hanratty [66] für sehr hohe  $Sc$  den Exponenten zu  $b = -0.704$  und numerisch fanden Na et al. mittels DNS den Zusammenhang  $K^+ \propto Sc^{-0.546}$  für  $1 < Sc < 10$ . Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Analogie zwischen Impuls und Massentransport bei hohen  $Sc$  nicht mehr gegeben ist. Im Folgenden wird ein Ausdruck für  $K^+(Sc, Re_\tau)$  entwickelt, mit der Annahme, dass die Dicke  $\Delta S$  der konduktiven Unterschicht mit  $\Delta S \propto Sc^r$  skaliert und dass das mittlere Skalarprofil dem Wandgesetz mit einem linearen und logarithmischen Bereich folgt. Das Wandgesetz besagt, dass das mittlere Skalarprofil innerhalb der konduktiven Unterschicht linear vom Wandabstand abhängt:

$$\langle \Phi^+ \rangle - \Phi_w^+ = Sc z^+. \quad (5.12)$$

Der logarithmische Bereich wird beschrieben durch:

$$\langle \Phi^+ \rangle - \Phi_w^+ = \frac{1}{\kappa_\Phi} \ln z^+ + B_\Phi. \quad (5.13)$$

Um beide Beziehungen zu kombinieren und einen allgemeinen Ausdruck für das mittlere Skalarprofil zu entwickeln, muss der Gültigkeitsbereich von Gleichung (5.12) bekannt sein, sprich die Dicke der konduktiven Unterschicht.



**Abbildung 5.14:** (a) Mittleres Skalarprofil mit Wandgesetz (5.12) und (5.13), (b) Dicke der konduktiven Unterschicht in Abhängigkeit von  $Sc$

Das normalisierte mittlere Skalarprofil bei verschiedenen  $Sc$  zusammen mit dem an die Daten angepassten Wandgesetz (5.12) und (5.13) ist in Abbildung 5.14a dargestellt. Die Dicke  $\Delta S$  der konduktiven Unterschicht wird hier über den Schnittpunkt zwischen dem linearen und dem logarithmischen Gesetz definiert. Diese Vorgehensweise überschätzt die Dicke zwar leicht, erlaubt aber eine eindeutige Bestimmung. Die an die Daten angepassten Koeffizienten  $\kappa_\Phi$  und  $B_\Phi$ , zusammen mit der empirisch ermittelten Dicke  $\Delta S$  sind in Tabelle 5.2 aufgelistet.

**Tabelle 5.2:** Parameter des Wandgesetzes und Dicke der konduktiven Unterschicht aus den DNS Daten.

$Sc$	$\kappa_\Phi$	$B_\Phi$	$\Delta S$
1	0.27	2.3	11.5
3	0.27	17.3	8.3
10	0.26	52.8	5.9
25	0.27	107.2	4.5
49	0.27	174.0	3.65

Die aus der DNS bestimmte Dicke  $\Delta S$  ist in Abbildung 5.14b in doppelt logarithmischer Darstellung abgebildet. Die Dicke skaliert mit  $\Delta S \propto Sc^{-0.29}$ . Dies widerspricht der Aussage von Na et al., dass diese mit  $\propto Sc^{-0.5}$  skaliert und ist etwas geringer als der mittels der Taylor Reihen Entwicklung vorhergesagte Wert von  $\propto Sc^{-1/3}$  [24]. Diese Unterschiede könnten auf die in dieser Arbeit benutzte Definition mittels des Schnittpunktes zurückzuführen sein,

da mit dieser Definition der Schnittpunkt etwas außerhalb des linearen Bereiches liegt. Na et al. hingegen geben keine eindeutige Definition an wie der Schnittpunkt bestimmt wurde und eine visuelle Interpretation der Daten ist nicht zufrieden stellend. Warum der hier ermittelte Exponent nicht mit dem theoretisch ermittelten Exponenten aus der Reihenentwicklung übereinstimmt ist eine offene Frage und sollte in weiteren Untersuchungen geklärt werden.

Mit den Parametern aus Tabelle 5.2 kann die Gleichung für den linearen Bereich (5.12) mit dem logarithmischen Bereich (5.13) am Schnittpunkt gleichgesetzt werden:

$$Sc\Delta S^+ = \frac{1}{\kappa_\Phi} \ln \Delta S^+ + B_\Phi . \quad (5.14)$$

Der Wandabstand des Schnittpunktes  $\Delta S^+$  hängt, wie in Abbildung 5.14b ersichtlich, nur von  $Sc$  ab:

$$\Delta S^+ = \xi Sc^{-0.29} , \quad \text{mit } \xi = 11.5 \quad \text{bei } Sc = 1.0 . \quad (5.15)$$

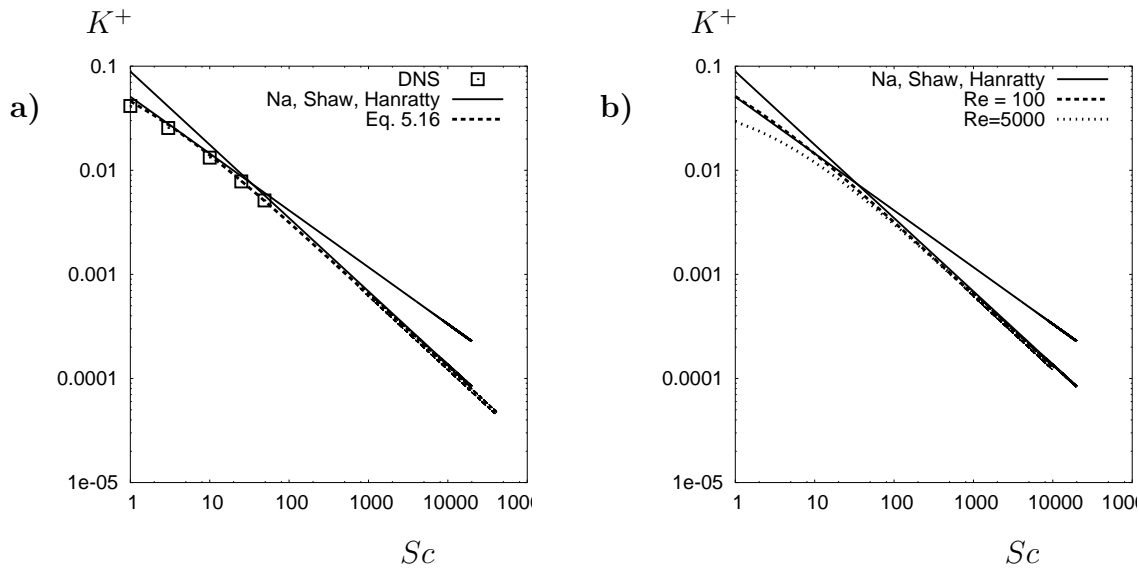
Mit Gleichung (5.14) und (5.15) ergibt sich ein Ausdruck für  $B_\Phi$  und mit diesem kann eine allgemeine Beschreibung für das mittlere Skalarprofil im logarithmischen Bereich angegeben werden:

$$\langle \Phi^+ \rangle - \Phi_w^+ = \frac{1}{\kappa_\Phi} \ln z^+ + \xi Sc^{0.71} + \frac{0.29}{\kappa_\Phi} \ln Sc - \frac{1}{\kappa_\Phi} \ln \xi . \quad (5.16)$$

Diese Gleichung ist in inneren Koordinaten gegeben und kann daher Reynoldszahleneffekte abbilden. Diese allgemeine Beschreibung des mittleren Skalarprofils ist nur von dem Wandabstand in inneren Koordinaten und von den empirisch ermittelten Parametern  $\kappa_\Phi = 0.27$ ,  $\xi = 11.5$  und  $r = 0.29$  abhängig. Berechnet man die Konzentration in der Kanalmitte  $\Phi_C$  mit Gleichung (5.16) so kann der dimensionslose Stoffübergangskoeffizient  $K^+$  direkt mit Gleichung (5.11) ermittelt werden:

$$K^+ = \frac{1}{\frac{1}{\kappa_\Phi} \ln Re_\tau + \xi Sc^{1-r} + \frac{r}{\kappa_\Phi} \ln Sc - \frac{1}{\kappa_\Phi} \ln \xi} . \quad (5.17)$$

Die experimentell ermittelte Beziehung  $K^+ = 0.0889Sc^{-0.704}$  von Shaw und Hanratty [66] für den Bereich  $600 < Sc < 36000$ , die Kurve  $K^+ = 0.0509Sc^{-0.546}$ , welche den DNS Daten von Na et al. [45] angepasst ist, die Ergebnisse der hier durchgeführten DNS (Symbole) sowie  $K^+$  nach der hier entwickelten Beziehung (5.17) sind in Abbildung 5.15a dargestellt. Die Übereinstimmung zwischen beiden empirischen Kurven, den DNS Ergebnissen und Gleichung



**Abbildung 5.15:** (a) Stoffübergangskoeffizient über  $Sc$  bei  $Re_\tau = 180$ , (b) Stoffübergangskoeffizient über  $Sc$  bei  $Re_\tau = 100$  und  $Re_\tau = 5000$

(5.17) ist exzellent. Beziehung (5.17) kann den glatten Übergang zwischen den empirischen Kurven bei niedrigen und hohen  $Sc$  sehr gut wiedergeben, kann also beide Regime, welche sich durch die unterschiedlichen empirischen Exponenten der anderen Autoren widerspiegeln, beschreiben. Zusätzlich ist in Gleichung (5.17) die Abhängigkeit von  $Re_\tau$  enthalten. Eine Veränderung von  $Re_\tau$  beeinflusst  $K^+$  nur bei niedrigen  $Sc$ , was in Abbildung 5.15b verdeutlicht wird. Bei hohen  $Sc$  wird  $K^+$  unabhängig von  $Re_\tau$  und Gleichung (5.17) reduziert sich zu  $K^+ = 0.086957Sc^{-0.71}$ , was fast der Formel von Shaw und Hanratty entspricht. Bei den niedrigen  $Sc$  erkennt man eine kleine Abweichung zwischen den hier präsentierten Ergebnissen aus der DNS und Gleichung (5.17). Dies liegt daran, dass bei Berechnung von  $\Phi_C^+$  mit der Gleichung des logarithmischen Bereichs die Konzentrationsdifferenz  $\Delta\Phi^+$  unterschätzt wird. Wie Abbildung 5.14 zeigt, gibt es eine Abweichung zwischen dem logarithmischen Profil und der mittleren Konzentration in der Kanalmitte, ähnlich wie beim "velocity defect" [51]. Diese Abweichung nimmt mit steigender  $Sc$  ab.

Die Interpretation des Verlaufs von  $K^+$  über  $Sc$  ist mit der Dicke der konduktiven Unterschicht verknüpft. Der Stoffübergang sinkt mit sinkender Diffusivität, also mit steigender  $Sc$ . Innerhalb der konduktiven Unterschicht herrscht der größte Gradient und damit findet dort die größte Veränderung in den Werten des Skalarfeldes statt. Das Verhältnis der Dicke dieser Unterschicht zu den turbulenten Strukturen bestimmt wie viel an Skalar durch turbulente Bewegungen, so genannte "Ejections" von der Wand in den Kanal transportiert wird. Sobald die konduktive Unterschicht deutlich dünner als die viskose Unterschicht ist, reduziert sich der wandnormale turbulente Transport des Skalars und die weitere Entwicklung hängt nur noch von der molekularen Diffusion und nicht mehr von der turbulenten Strömung ab. Daher wird bei hohen  $Sc$  der Verlauf von  $K^+$  unabhängig von  $Re_\tau$ .

## 5.9 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Durchführung und Auswertung der DNS der turbulenten Kanalströmung und Vermischung bei  $Re_\tau = 180$  und  $Sc = 3$  bis  $Sc = 49$  beschrieben. Diese Simulationen werden im weiteren Verlauf der Arbeit benutzt um ein Mikromischmodell für die DNS-FDF Methode zu entwickeln und a priori zu untersuchen. Die DNS dieser Strömung ermöglichte zusätzlich die Auswertung der Statistiken erster und zweiter Ordnung, der einzelnen Terme der Transportgleichung für die skalare Varianz, der skalaren Längenmaße, der turbulenten Schmidt Zahl und des "mechanical to scalar time scale ratio". Diese Auswertungen wurden in diesem Kapitel ausgeführt und es konnte gezeigt werden, dass selbst in dieser einfachen, nicht homogenen, wandgebundenen Strömung bei niedriger Reynolds Zahl die gängigen Mischmodelle aus der Literatur nicht ohne weiteres übernommen werden können und eine  $Sc$  Abhängigkeit für die Modellparameter existiert. Auch findet sich noch nicht die von Batchelor [3] hergeleitete Skalierung für die kleinsten skalaren Längenmaße. Zusätzlich konnte mit Hilfe dieser DNS Daten eine Relation für den Stoffübergangskoeffizienten entwickelt werden, die nur auf der empirisch ermittelten Dicke der diffusiven Unterschicht beruht und eine exzellente Übereinstimmung mit experimentell ermittelten Daten für einen sehr großen Bereich an  $Sc$  erbringt.



# 6 Gefilterte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Im Gegensatz zu der im Kapitel 2 eingeführten Euler'schen Beschreibung der strömungsmechanischen Variablen, insbesondere des Skalars, beruht der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktions-Ansatz auf einer statistischen Beschreibung der relevanten Größen. Motiviert wird dieser Ansatz durch die Tatsache, dass bei turbulenten Strömungen die Strömungsgrößen *random* sind. Bezogen auf den Skalar bedeutet dies, dass  $\Phi(x, t)$  eine Zufallsgröße ist. Die Zufallsgröße wird komplett durch die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ("probability density function", PDF) beschrieben, da alle statistischen Momente, wie zum Beispiel Mittelwert  $\langle \Phi(x, t) \rangle$  oder Varianz  $\langle \Phi'^2(x, t) \rangle$ , daraus gebildet werden können. Der große Vorteil dieser Formulierung liegt daran, dass der nicht lineare Reaktionsterm in geschlossener Form vorliegt, der Nachteil ist die nicht geschlossene Form des Mikromischterms. Kombiniert man diesen Ansatz mit einer Beschreibung des Strömungsfeldes durch eine DNS, ist auch der konvektive Transportterm geschlossen. Daher wird erwartet, dass bei Verwendung dieses Ansatzes und bei einer konsistenten Modellierung des Mikromischterms alle Skalen eines Vermischungsprozesses genau beschrieben werden können. In diesem Kapitel werden die Grundlagen für die Beschreibung des Skalarfeldes mit der gefilterten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (FDF) dargelegt und die Monte-Carlo Methode zur Lösung der Transportgleichung der FDF beschrieben. Eine detailliertere Einführung in die statistische Beschreibung turbulenter Strömungen findet man bei Pope [51] und eine detailliertere Einführung in stochastische Prozesse bei Gardiner [19].

## 6.1 Transportgleichung der gefilterten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eines Skalars

In einer turbulenten Strömung ist das Geschwindigkeitsfeld  $u_i(x, t)$  *random*. Da die Fluidgeschwindigkeit auch in der Skalartransportgleichung (2.21) auftaucht, ist auch das Skalarfeld  $\Phi_\alpha(x, t)$  eine *randome* Größe. Um diese statistisch beschreiben zu können, führen wir eine dazugehörige Zustandsraum-Variable  $\Psi_\alpha$  ein. Die Wahrscheinlichkeit  $P$ , dass man eine bestimmte Konzentration  $\Phi_\alpha(x_1, t_1)$  des Skalars  $\alpha$  innerhalb eines Intervalls  $d\Psi_\alpha$  an einem bestimmten Ort  $x_1$  und zu einer bestimmten Zeit  $t_1$  antrifft, ergibt sich aus der Integration

der *Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion* (PDF)  $p(\Psi_\alpha; \vec{x}, t)$ :

$$P \{ \Psi_\alpha \leq \Phi_\alpha < \Psi_\alpha + d\Psi_\alpha \} = \int_{\Psi_\alpha}^{\Psi_\alpha + d\Psi_\alpha} p(\Theta_\alpha; \vec{x}, t) d\Theta_\alpha . \quad (6.1)$$

Die PDF hat als Einheit  $1/[\Phi_\alpha]$  und folgende Eigenschaften:

- die PDF erfüllt die Normalisierungsbedingung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(\Psi_\alpha; \vec{x}, t) d\Psi_\alpha = 1 . \quad (6.2)$$

- Gewisse Ereignisse<sup>1</sup> sind unmöglich:

$$p(-\infty; \vec{x}, t) = p(\infty; \vec{x}, t) = 0 . \quad (6.3)$$

Der PDF zugrunde liegt die "fine-grained" PDF. Für einen Skalar lautet diese:

$$\varrho[\Psi_\alpha, \Phi_\alpha(\vec{x}, t)] = \delta[\Psi_\alpha - \Phi_\alpha(x, t)] = \prod_{\alpha=1}^{N_s} \delta[\Psi_\alpha - \Phi_\alpha(x, t)] . \quad (6.4)$$

Die "fine-grained" PDF ist also eine  $N_\alpha$  dimensionale Delta-Funktion.  $\Phi_\alpha(\vec{x}, t)$  ist dabei die zu beschreibende Zufallsgröße. Aus der Reynoldsmittelung dieser erhält man die PDF:

$$p(\Psi_\alpha, \vec{x}, t) = \langle \varrho[\Psi_\alpha, \Phi_\alpha(\vec{x}, t)] \rangle . \quad (6.5)$$

Der Mittelungsoperator ist dabei im allgemeinsten Fall eine Ensemble Mittelung und kann wie in den RANS Methoden bei Homogenität in Zeit und Raum entsprechend angepasst werden. Führt man an dieser Stelle eben keine Ensemble Mittelung durch, sondern benutzt

<sup>1</sup>Hier wurde für "gewisse Ereignisse" die Zustände  $\Psi = \pm\infty$  verwendet. Im Allgemeinen ist der Skalar aber beschränkt und es gibt eine definitive Unter- und Obergrenze  $\Phi_{min}$  und  $\Phi_{max}$

wie in der LES einen räumlichen Filter, so erhält man die "filtered density function" (gefilterte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, FDF) des Skalarvektors:

$$P_L(\Psi_\alpha; \vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varrho[\Psi_\alpha, \Phi_\alpha(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}' . \quad (6.6)$$

Die FDF beschreibt die instantane und "räumliche" PDF des Skalars in der Umgebung  $\vec{x}$ , gewichtet mit dem Filter  $G(\vec{x}' - \vec{x})$ . Damit ist klar, dass mit der Definition eines positiven Filter-Kernel die FDF alle Eigenschaften einer PDF besitzt. Aus der passiven Skalartransportgleichung kann man die Transportgleichung für die FDF herleiten (siehe Anhang A.1). Ist die turbulente Strömung räumlich und zeitlich vollständig aufgelöst, lautet diese:

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} + u_i \frac{\partial P_L}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[ \overline{\Gamma \frac{\partial^2 \Phi_\alpha}{\partial x_i^2} \middle| \vec{\Psi}} P_L \right] - \frac{\partial \omega(\Psi_\alpha) P_L}{\partial \Psi_\alpha} . \quad (6.7)$$

Die linke Seite von Gleichung (6.7) ist die substantielle Ableitung der FDF, bestehend aus zeitlicher Veränderung und konvektivem Transport. Im Gegensatz zu den LES-FDF Methoden (Colucci et. al. [8], Raman et. al. [55]) ist der konvektive Transport der FDF im Raum bei einer DNS des Geschwindigkeitsfeldes geschlossen und es besteht kein Modellierungsbedarf. Der letzte Term auf der rechten Seite beschreibt einen Quellen- oder Senkenterm (üblicherweise die chemische Reaktion). Dieser Term ist geschlossen, was die große Attraktivität der FDF (bzw. PDF) Methoden begründet. Der erste Term auf der rechten Seite beschreibt die gesamte Diffusion innerhalb der Filterweite, konditioniert auf den am Ort  $\vec{x}$  zum Zeitpunkt  $t$  vorhandenen Zustand  $\Psi_\alpha$  im Zustandsraum. Diese so genannte *konditionierte Filterung* ist im Anhang definiert. Die räumliche Ableitung des Skalars in diesem Term kann mit der Eulerschen FDF, welche den Skalar für einen Zeitpunkt und an einer Ortskoordinate beschreibt ("one point, one time"), nicht direkt berechnet werden und muss daher modelliert werden. Die Lösung dieser FDF Transportgleichung liefert die instationären und räumlich variierenden FDFs durch welche das gesamte Skalarfeld beschrieben ist. Die konditionierte Diffusion kann in einen Term, der die Diffusion der FDF im Raum beschreibt, und einen Term, der die konditionierte Dissipation im Zustandsraum darstellt, aufgespalten werden:

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} + u_i \frac{\partial P_L}{\partial x_i} = \Gamma \frac{\partial^2 P_L}{\partial x_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial \Psi_\alpha \partial \Psi_\beta} \left[ \overline{\Gamma \left( \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_\beta}{\partial x_i} \middle| \vec{\Psi} \right) P_L} \right] - \frac{\partial \omega(\Psi_\alpha) P_L}{\partial \Psi_\alpha} . \quad (6.8)$$

Diese Aufspaltung des diffusiven Terms ist in dieser Art und Weise nur bei für jeder Spezies identischer Diffusivität  $\Gamma$  möglich und wurde von Colucci et al. [8] benutzt. Eine andere Schreibweise der FDF verzichtet auf diese Aufspaltung des diffusiven Terms und benutzt stattdessen eine Aufspaltung in aufgelöste und nicht aufgelöste Diffusion<sup>2</sup> [55]:

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} + u_i \frac{\partial P_L}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left\{ \left( \Gamma \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i^2} + \Gamma \overline{\frac{\partial^2 \Phi'_\alpha}{\partial x_i^2}} \Big| \Psi + \omega(\Psi_\alpha) \right) P_L \right\}. \quad (6.9)$$

Diese Aufspaltung hat ihren Ursprung in den RANS-PDF Methoden [16].

## 6.2 Lösung der FDF Transportgleichung

In der Literatur gibt es mehrere Vorschläge wie die FDF Transportgleichung (bzw. PDF Transportgleichung im RANS Kontext) gelöst werden kann. Als "volle PDF" Methoden, also Methoden welche ohne Annahmen über die Form der PDF die Transportgleichung (6.8) direkt lösen, gibt es z. B. die "direct quadrature method of moments" (DQMOM) (Marchisio and Fox [39], Fox [16]) oder die Monte-Carlo Methode (Pope [53], Colucci et al. [8]). In dieser Arbeit wird die Monte-Carlo Methode benutzt. Diese basiert auf dem Prinzip von statistisch äquivalenten Systemen. Das bedeutet, dass zwei Systeme zwar instantan unterschiedliche Zustände aufweisen mögen, aber die gleiche Statistik produzieren können. Zur Einführung dieser Methode wird in diesem Kapitel zuerst der *Markov*-Prozess erklärt. Danach werden zwei Prozesse bzw. Systeme beschrieben, zum einen die *Fokker Planck Gleichung*, welche direkt aus der Definition eines Markov Prozesses hergeleitet werden kann, und zum anderen die *Ito Stochastische Differentialgleichung* (Ito-SDE). Diese beiden Gleichungen beschreiben bei geeigneter Wahl der Koeffizienten statistisch identische Systeme. Die Fokker Planck Gleichung entspricht der FDF Transportgleichung und die Ito SDE ist die Bestimmungsgleichung für den Transport von stochastischen Partikeln, die dann letztendlich gelöst wird.

### 6.2.1 Stochastische Prozesse - Markov Prozess

Ein stochastischer Prozess beschreibt ein System mit einer bestimmten, zeitabhängigen Zufallsgröße  $\vec{x}(t)$ . Diese Zufallsgröße wird durch die Ziehung von Stichproben  $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots$  zu verschiedenen Zeitpunkten  $t_1, t_2, \dots$  beschrieben. Im allgemeinsten Fall wird die Zufallsgröße  $\vec{x}(t)$  durch die "joint probability densities", also die Wahrscheinlichkeiten dass zu bestimmten Zeitpunkten  $t_n$  die Zufallsgröße die Werte  $\vec{x}_n$  annimmt, vollständig beschrieben:  $p(\vec{x}_1, t_1, \vec{x}_2, t_2, \dots)$ . Die Reihenfolge der Zeitpunkte  $t_n$  ist dabei eigentlich unerheblich, im Allgemeinen wird aber davon ausgegangen dass  $t_{n+1} > t_n$ . Der Zufallsgröße  $\vec{x}$  muss als abstrakter

<sup>2</sup>Die Aufspaltung in aufgelösten und nicht aufgelösten Anteil wird durch den Filteroperator  $G(\Delta x)$  definiert

Wahrscheinlichkeitsraum angesehen werden der alle möglichen Einzelereignisse  $x$  enthält. So kann man sich vorstellen dass  $\vec{x}$  alle möglichen Konzentrationen in einem bestimmten Volumen enthält. In diesem Fall wäre  $p(\vec{x}, t)$  also die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Konzentration in einem bestimmten Volumen zu einem Zeitpunkt. Im einfachsten Fall ist  $\vec{x}(t)$  die Position  $\vec{x}(t)$  eines Moleküls im Raum, womit der Begriff des "sample path" auch anschaulich als die zeitabhängige Position des Moleküls  $x(t)$  verstanden wird. Ein *Markov* Prozess wird nun als Zufallsprozess eingeführt, welcher nur durch den letzten bekannten Zustand  $y_1, \tau_1$  bestimmt wird:

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots | y_1, \tau_1; y_2, \tau_2; \dots) = p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots | y_1, \tau_1) . \quad (6.10)$$

Anschaulich kann man sich vorstellen dass  $y_n$  die vergangenen und  $x_n$  die zukünftigen Positionen beschreibt. Die konditionierte Wahrscheinlichkeit ist dabei definiert als:

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots | y_1, \tau_1; y_2, \tau_2, \dots) = \frac{p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; y_1, \tau_1; y_2, \tau_2, \dots)}{p(y_1, \tau_1; y_2, \tau_2; \dots)} . \quad (6.11)$$

Mit der Definition der konditionierten Wahrscheinlichkeit lässt sich eine Aussage über die zeitliche Entwicklung des Markov Prozesses treffen:

$$p(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int p(x_3, t_3 | x_2, t_2) p(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2 . \quad (6.12)$$

Diese Gleichung wird als Chapman-Kolmogorov Gleichung bezeichnet. Benutzt man die Interpretation von  $x$  als die Position eines Moleküls, so ist  $p(x_2, t_2 | x_1, t_1)$  die Wahrscheinlichkeitsdichte der möglichen Positionen wenn das Partikel zum Zeitpunkt  $t_1$  am Ort  $x_1$  gestartet ist. Es ist intuitiv dass über alle Möglichkeiten  $x_2$  integriert werden muss um die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p(x_3, t_3 | x_1, t_1)$  zu erlangen.

## 6.2.2 Fokker-Planck Gleichung

Unter gewissen Voraussetzungen [19] kann die Chapman-Kolmogorov Gleichung in eine differentielle Chapman-Kolmogorov Gleichung umgewandelt werden. Dabei wird der Prozess welcher die PDF zeitlich verändert in kontinuierliche und nicht-kontinuierliche Prozesse aufgespalten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\vec{x}, t | \vec{y}, t')}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x_i} [A_i p(\vec{x}, t | \vec{y}, t')] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [B_{ij} p(\vec{x}, t | \vec{y}, t')] \\ &+ \int W(\vec{x} | \vec{z}, t) p(\vec{z}, t | \vec{y}, t') - W(\vec{z} | \vec{x}, t) p(\vec{x}, t | \vec{y}, t') d\vec{z}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Der letzte Term auf der rechten Seite beschreibt dabei die diskontinuierlichen Sprungprozesse wobei

$$W(\vec{x} | \vec{z}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{p(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)}{\Delta t} \quad (6.14)$$

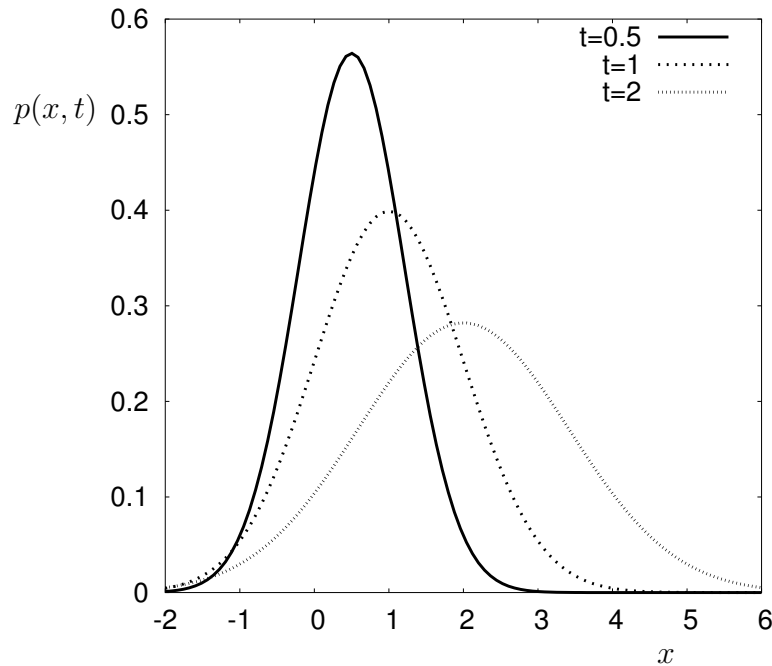
ein Maß für die Größe des Sprungs darstellt. Dieser Term kann für den Fall dass der Markov Prozess kontinuierlich ist, also einen kontinuierlichen "sample-path" besitzt, vernachlässigt werden. Dies ist der Fall wenn die konditionierte Wahrscheinlichkeit  $p(\vec{x}, t + \Delta t | \vec{z}, t)$ , unter der Bedingung dass  $|\vec{x} - \vec{z}| > \epsilon$ , schneller zu Null geht als  $\Delta t \rightarrow 0$ . Das bedeutet, dass es für ein verschwindendes  $\Delta t$  keine Wahrscheinlichkeitsdichteunterschiede geben kann, bzw. in der Molekülinterpretation, dass sich für verschwindendes  $\Delta t$  der Ort des Moleküls nicht unterscheiden kann. Unter diesen Voraussetzungen geht die differentielle Chapman-Kolmogorov Gleichung in die Fokker-Planck Gleichung über:

$$\frac{\partial p(\vec{x}, t | \vec{y}, t')}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [A_i(\vec{x}, t) p(\vec{x}, t | \vec{y}, t')] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [B_{ij}(\vec{x}, t) p(\vec{x}, t | \vec{y}, t')]. \quad (6.15)$$

Der erste Term auf der rechten Seite mit dem Vektor  $A_i(\vec{x}, t)$  wird als Drift-, der zweite Term mit der Matrix  $B_{ij}(\vec{x}, t)$  als Diffusions-Term bezeichnet. Im allgemeinen Fall können der Driftvektor und die Diffusionsmatrix von den Zustandsraumvariablen  $\vec{x}$  abhängig sein. Mathematisch beschreibt die Fokker-Planck Gleichung einen Diffusionsprozess. Für die Anfangsbedingung  $p(\vec{x}, t | \vec{y}, t) = \delta(\vec{x} - \vec{y})$  und für kurze Zeiten  $\Delta t$  können die Koeffizienten als konstant angenommen werden. Eine Analytische Lösung für die Fokker-Planck Gleichung für einen eindimensionalen Zustandsraum  $\vec{x} = x$  und für die Ausgangsposition  $\vec{y} = x_0 = 0, t_0 = 0$  lautet dann:

$$p(x, \Delta t) = \left( \frac{1}{2\pi B \Delta t} \right)^{1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} \frac{(x - A \Delta t)^2}{B \Delta t} \right] i, \quad \text{mit } \Delta t = t - t_0. \quad (6.16)$$

Abbildung 6.1 zeigt die zeitliche Entwicklung von Gleichung (6.16). In diesem Falle beschreibt die Fokker-Planck Gleichung eine Gauss-Verteilung mit dem Mittelwert  $A \Delta t$  und der Varianz



**Abbildung 6.1:** Zeitliche Entwicklung der Gleichung (6.16) mit  $A = 1.0$  und  $B = 1.0$ . Anfangsbedingung war ein Dirac-Impuls  $p(x_0, t_0) = \delta(x)$ .

$B\Delta t$  (bzw. Standardabweichung  $\sqrt{B\Delta t}$ ). Der Drift Term verschiebt also den Mittelwert, der Diffusionsterm sorgt dafür dass die Verteilung breiter und flacher wird.

### 6.2.3 Wiener Prozess

Eine Lösung der Fokker-Planck Gleichung mit nur einer Variable  $W(t)$ , dem Driftkoeffizienten  $A = 0.0$ , dem Diffusionskoeffizienten  $B = 1.0$  und mit der Anfangsbedingung  $p(w, t_0|w_0, t_0) = \delta(w - w_0)$  wird Wiener Prozess genannt. Wie leicht aus Abbildung 6.1 erkennbar entspricht die Lösung dem Ausweiten einer Gaußverteilung mit dem Mittelwert  $\langle W(t) \rangle = w_0$  und der Varianz  $\langle w(t)^2 \rangle = \Delta t$ . Die "sample paths" des Wiener Prozesses sind kontinuierlich aber nicht differenzierbar und entsprechen der Brown'schen Molekülbewegung [19]. Da der Wiener Prozess ein Markov Prozess ist, ist das Inkrement eines Wiener Prozesses statistisch unabhängig. Das bedeutet das die Variablen  $\Delta W_i = W(t_i) - W(t_{i-1})$  unabhängig voneinander sind. Wichtige Eigenschaften eines Wiener Prozesses sind:

$$\begin{aligned} \langle \Delta W_i \rangle &= 0, \\ \langle \Delta W_i^2 \rangle &= \Delta t_i. \end{aligned} \tag{6.17}$$

### 6.2.4 Stochastische Differentialgleichung

Für eine stochastische Größe  $x(t)$ , welche durch die Ito-Stochastische Differentialgleichung (SDE)

$$dx(t) = a[x(t), t] dt + b[x(t), t] dW(t) \quad (6.18)$$

beschrieben wird, gilt:

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t a[x(t'), t'] dt' + \int_{t_0}^t b[x(t'), t'] dW(t'). \quad (6.19)$$

Dabei ist  $dW(t)$  das Inkrement eines Wiener Prozesses mit der Varianz  $dt$ . Die Ito-SDE wird aus der Langevin-SDE durch die Definition des Ito-Integrals hergeleitet [19]. Betrachtet man nun eine beliebige Funktion  $f(x(t))$  die von dem Zufallsprozess  $x(t)$  abhängt, kann mit Hilfe der Ito-Formel [19] und Gleichung (6.18) der Erwartungswert der zeitlichen Veränderung von  $f(x(t))$  umgeformt werden:

$$\frac{\langle df[x(t)] \rangle}{dt} = \left\langle a[x(t), t] \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2} b[x(t), t]^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right\rangle. \quad (6.20)$$

Dem Zufallsprozess  $x(t)$  liegt eine konditionierte Wahrscheinlichkeitsdichte  $p(x, t|x_0, t_0)$  zugrunde, und der Erwartungswert der Funktion  $f(x(t))$  ergibt sich aus der Integration über den Zustandsraum:

$$\frac{d}{dt} \langle f[x(t)] \rangle = \int \left[ a[x(t), t] \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2} b[x(t), t]^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right] p(x, t|x_0, t_0) dx. \quad (6.21)$$

Die rechte Seite kann mit Hilfe der partiellen Integration und der Annahme dass  $p(x, t|x_0, t_0)$  an den Integrationsgrenzen vernachlässigt werden kann, umgeformt werden:

$$\int \left[ a[x(t), t] \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2} b[x(t), t]^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right] p(x, t|x_0, t_0) dx = \int f(x) \left\{ -\frac{\partial a(x, t) p(x, t|x_0, t_0)}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 b(x, t)^2 p(x, t|x_0, t_0)}{\partial x^2} \right\} dx. \quad (6.22)$$



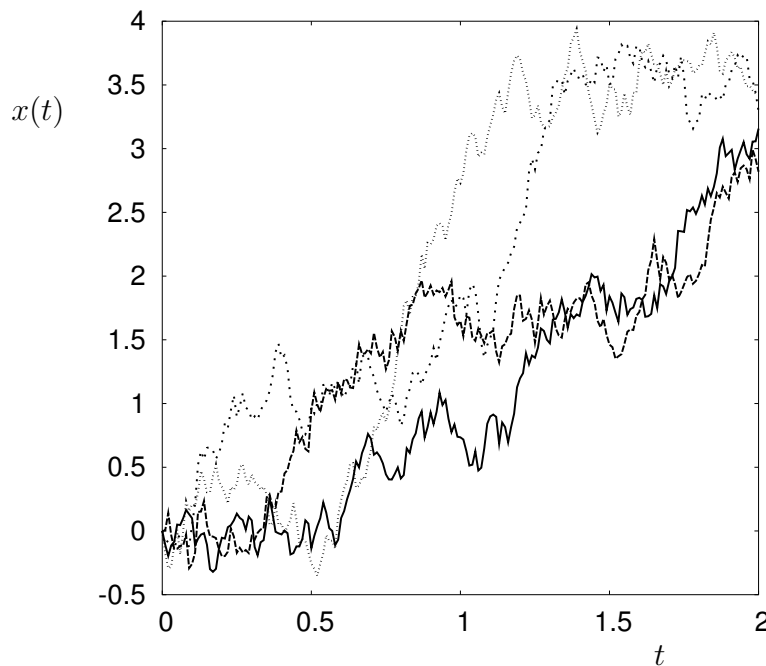
Da diese Gleichung für jedes  $f(x)$  gilt, gilt auch:

$$\frac{\partial p(x, t|x_0, t_0)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [a(x, t)p(x, t|x_0, t_0)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [b(x, t)^2 p(x, t|x_0, t_0)] . \quad (6.23)$$

Damit zeigt sich, dass die zeitliche Entwicklung der PDF der Zufallsgröße  $x(t)$ , welche durch die Ito-SDE (6.18) beschrieben wird, der zeitlichen Entwicklung der PDF durch die Fokker-Planck Gleichung (6.15) entspricht, wenn die Drift- und Diffusionskoeffizienten übereinstimmen. Für den eindimensionalen Fall gilt also

$$A(x, t) = a(x, t) \quad \text{und} \quad B(x, t) = b(x, t)^2 . \quad (6.24)$$

Gleichung (6.19) gibt dabei die integrale Form an, welche numerisch gelöst werden muss, um den zeitlichen Verlauf der Zufallsgröße  $x(t)$  zu bestimmen.



**Abbildung 6.2:** 4 Realisationen der zeitlichen Entwicklung der Zufallsgröße  $x(t)$  nach Gleichung (6.19) mit  $A = 1.0$  und  $B = 1.0$ . Anfangsbedingung war ein Dirac-Impuls  $p(x_0, t_0) = \delta(x)$ .

Vier verschiedene Realisationen der Ito-SDE (6.19) sind in Abbildung 6.2 dargestellt. Alle "sample-paths" wurden bei  $x(0) = 0$  initialisiert. Der Driftkoeffizient ist  $a(x, t) = 1.0$  und der Diffusionskoeffizient ist  $b(x, t) = 1.0$ . Der letzte Term von Gleichung (6.19) wird dabei

mit

$$\int_{t_0}^{t_0+\Delta t} b(x(t'), t') dW(t') = b(x(t_0), t_0) \sqrt{\Delta t} \xi(t) \quad (6.25)$$

angenähert.  $\xi(t)$  ist dabei eine Zufallszahl mit einer standardisierten Gaussverteilung mit Mittelwert  $\langle \xi(t) \rangle = 0$  und Varianz  $\langle \xi(t)^2 \rangle = 1$ . Die zeitliche Entwicklung der PDF der Zufallsgröße  $x(t)$  nach Gleichung (6.19) entspricht also genau der Lösung der Fokker-Planck Gleichung (6.15) bzw. der Gleichung (6.16) da die Koeffizienten identisch sind. Damit sind die Lösungen von Gleichung (6.15) und (6.18) im statistischen Sinne äquivalent.

### 6.2.5 Monte-Carlo-Methode

Bei der Monte-Carlo Methode nutzt man die Äquivalenz der Fokker-Planck Gleichung mit der Ito-SDE bei entsprechender Wahl der Koeffizienten. Die Transportgleichung der FDF (6.8) ist eine Fokker-Planck Gleichung. Die Ito-SDE (6.18) wird für eine große Anzahl von stochastischen Partikel im Strömungsfall gelöst, und wegen der Äquivalenz kann aus der Statistik der stochastischen Partikeln die lokale und instantane FDF des Skalars gewonnen werden. Für die Partikel kann man eine Lagrange-FDF definieren (vereinfacht für nur eine Spezies):

$$p_{\Phi, \vec{x} | \vec{Y}}^+(\Psi, \vec{x} | \vec{Y}; t) . \quad (6.26)$$

$p^+$  beschreibt die gefilterte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Zufallsvariablen  $\Psi$  und  $\vec{x}$  auf einer Lagrangebahn<sup>3</sup> unter der Bedingung, dass diese bei  $\vec{Y}$  startete. Mit der zugehörigen "fine grained" Dichte ist die Lagrange-FDF bestimmt mit:

$$p^+(\Psi, \vec{x} | \vec{Y}; t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta \left[ \Psi - \Phi^+(\vec{Y}, t) \right] \prod_{i=1}^3 \delta \left[ x'_i - X_i^+(\vec{Y}, t) \right] G(x'_i - x_i) dx'_i . \quad (6.27)$$

Um die Schreibweise zu vereinfachen soll im weiteren nur noch eine Raumkoordinate  $x$  betrachtet werden<sup>4</sup>. Integriert man nun über alle möglichen Startpositionen  $Y$ , und ersetzt

<sup>3</sup>Der Lagrange Kontext wird durch die Indizierung mit  $+$  angezeigt

<sup>4</sup>Daher werden die Vektor-Pfeile bei der Raumkoordinaten  $x$  und  $Y$  weggelassen.

dabei  $dY = J^{-1}dX^+$ , wobei bei inkompressiblen Strömungen für die Jakobimatrix  $J = 1$  gilt [51], erhält man:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p^+(\Psi, x|Y; t)dY = \iint_{-\infty}^{+\infty} \delta[\Psi - \Phi^+(Y, t)] \delta[x' - X^+(Y, t)] G(x' - x) dx' dX^+ . \quad (6.28)$$

Durch die "sifting" Eigenschaft der Deltafunktion [51] werden nur die Orte heraus gepickt an denen  $X^*(Y, t) = x'$  ist, und somit ergibt sich aus obiger Gleichung

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \delta[\Psi - \Phi^+(Y, t)] \int_{-\infty}^{+\infty} \delta[x' - X^+(Y, t)] dX^+ G(x' - x) dx' = \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} \delta[\Psi - \Phi^+(Y, t)] |_{X^+(Y, t)=x'} G(x' - x) dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta[\Psi - \Phi(x, t)] G(x' - x) dx'. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Die Eulersche FDF erhält man also aus der Lagrange-FDF über eine Integration aller möglichen Startpositionen  $Y$ :

$$P_L(\Psi; x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} p^+(\Psi, x|Y; t)dY . \quad (6.30)$$

Damit ist für die Berechnung der Eulerschen FDF die Startposition des stochastischen Partikels nicht mehr relevant, es zählt nur noch, dass sich das Partikel in der Umgebung von  $x$  befindet.

Für die stochastischen Partikel wird die stochastische DGL (6.18) für die Zufallsgrößen  $x_i(t)$  und  $\Psi_\alpha(t)$  aufgestellt. Dabei werden die Zufallsgrößen in einem Vektor zusammengefasst

$$\begin{pmatrix} x_i \\ \Psi_\alpha \end{pmatrix} = Z_j,$$

und die Ito-SDE lautet:

$$dZ_i(t) = a_i[\vec{Z}(t), t]dt + b_{ij}[\vec{Z}(t), t]dW_j(t) . \quad (6.31)$$

Die zugehörige Fokker-Planck Gleichung für die gefilterte Wahrscheinlichkeitsdichte  $p^+ = p^+(Z; t)$  lautet:

$$\frac{\partial p^+}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial Z_i} \left\{ a_i[\vec{Z}(t), t] p^+ \right\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial Z_i \partial Z_k} \left\{ b_{ij}[\vec{Z}(t), t] b_{jk}[\vec{Z}(t), t] p^+ \right\}. \quad (6.32)$$

Ziel ist es nun, die Koeffizienten  $a_i$  und  $b_{ij}$  so zu wählen, dass Gleichung (6.32) und (6.8) übereinstimmen. Für die hier untersuchte, inkompressible Strömung mit einem passiven Skalar (ohne Rückwirkung auf das Strömungsfeld) sind viele Koeffizienten gleich Null. Die FDF Transportgleichung (6.8) enthält keine gemischten Ableitungen nach  $x_i$  und  $\Psi_\alpha$  und dies zeigt, dass die Koeffizientenvektor  $\vec{a}$  bzw. die Koeffizientenmatrix  $\mathbf{b}$  entkoppelt sind. Daher lässt sich Gleichung (6.32) mit (6.30) umformen zu:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x_i} \{ a_i[\vec{x}, t] P_L \} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \{ b_{ij}[\vec{x}, t] b_{jk}[\vec{x}, t] P_L \} \\ & -\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left\{ a_\alpha[\vec{\Psi}, \vec{x}, t] P_L \right\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \Psi_\alpha \partial \Psi_\beta} \left\{ b_{\alpha\gamma}[\vec{\Psi}, \vec{x}, t] b_{\gamma\beta}[\vec{\Psi}, \vec{x}, t] P_L \right\}. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Durch diese Trennung der Drift- und Diffusionsterme nach den Zufallsvariablen ergibt sich, dass die Entwicklung der FDF durch zwei getrennte stochastische Prozesse, einen für  $x_i(t)$  und einen für  $\Phi_\alpha(t)$ , beschrieben werden kann. Wird Gleichung (6.8) als Entwicklungsgleichung für die FDF herangezogen, so lässt sich bei einer inkompressiblen Strömung und bei konstantem Diffusionskoeffizienten schreiben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_L}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x_i} \{ u_i[x_i, t] P_L \} + \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \{ \Gamma P_L \} \\ & -\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \{ \omega_\alpha[\Psi_\beta, t] P_L \} - \frac{\partial^2}{\partial \Psi_\alpha \partial \Psi_\beta} \left\{ \overline{\Gamma \left( \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_\beta}{\partial x_i} \middle| \vec{\Psi} \right)} P_L \right\}. \end{aligned} \quad (6.34)$$

Aus dem Koeffizientenvergleich mit Gleichung (6.33) ergibt sich  $a_i[x_i, t] = u_i[x_i, t]$ ,  $b_{ij}[x_i, t] = \sqrt{2\Gamma} \delta_{ij}$  sowie  $a_\alpha[\Psi_\beta, t] = \omega_\alpha[\Psi_\beta, t]$ . Der Dissipationsterm der skalaren Zufallsvariable (der letzte Term auf der rechten Seite) ist nicht geschlossen und muss modelliert werden. Benutzt man hingegen Gleichung (6.9),

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P_L}{\partial t} = & \\
& - \frac{\partial}{\partial x_i} \{u_i[x_i, t]P_L\} \\
& - \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left\{ \left( \Gamma \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i^2} + \omega_\alpha[\Psi_\beta, t] \right) P_L \right\} - \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left\{ \Gamma \frac{\partial^2 \Phi'_\alpha}{\partial x_i^2} \Big| \Psi P_L \right\}, \tag{6.35}
\end{aligned}$$

so ist der Driftterm in der Ito-SDE für den Ort  $a_i[x_i, t] = u_i[x_i, t]$  identisch. Der Diffusionskoeffizient ergibt sich zu  $b_{ij} = 0$ . Die Koeffizienten für den Driftterm in der Ito-SDE für den Skalar ergibt sich aus der Diffusion des gefilterten Feldes und der chemischen Reaktion zu  $a_\alpha = \Gamma \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i^2} + \omega_\alpha(\Psi_\beta)$ . Durch die zu modellierende Diffusion der skalaren Fluktuationen ergibt sich noch ein weiterer Driftterm. In beiden Fällen beschreiben die zu modellierenden Terme das Mikromischen, also den Abbau von skalarer Varianz.

Die statistische Äquivalenz zwischen der Ito-SDE und der FDF Transportgleichung ergibt, dass stochastische Partikel welche der Ito-SDE (6.31) folgen eine äquivalente Statistik erzeugen wie die FDF  $P_L$  als Lösung der FDF-Transportgleichung. Voraussetzung dafür ist die korrekte Wahl der Koeffizienten  $a_i$  und  $b_{ij}$  aus dem Vergleich der Gleichungen (6.33) mit (6.34) oder der Gleichungen (6.33) mit (6.35). In jedem Fall ergeben sich zwei Ito-SDE, eine für die Position des Partikels und eine für den Konzentrationswert des Partikels. Benutzt man Formulierung (6.34) taucht ein stochastischer Term in der Ito-SDE für die Position des Partikels auf, benutzt man die Formulierung (6.35) taucht kein stochastischer Term in den Ito-SDEs auf. Diese unterschiedlichen Formulierungen werden in Kapitel 7 genauer untersucht und es wird gezeigt, dass bei hoher  $Sc$  beide Formulierungen in einander übergehen.



# 7 Modellierung des Mikromischens

In dieser Arbeit soll der Skalartransport mit der in Kapitel 6 eingeführten FDF Methode beschrieben werden. Die FDF Transportgleichung wird dabei mit der Monte-Carlo Methode direkt gelöst. Die Lösung basiert auf der statistischen Äquivalenz der FDF als Lösung der Fokker-Planck Gleichung (6.15) mit der FDF als Lösung der Ito-SDE (6.18) durch stochastische Partikel. Dabei werden die Koeffizienten in der Ito-SDE derart gewählt, dass die aus der Ito-SDE abgeleitete Fokker-Planck Gleichung genau der FDF Transportgleichung entspricht. Indem die FDF Transportgleichung an eine DNS der Strömung gekoppelt wird, verringert sich im Vergleich zu den LES-FDF Methoden der Modellierungsaufwand. Es muss nur der Mikromischterm, also der Term der für die Vernichtung von skalarer Varianz durch molekulare Prozesse verantwortlich ist, modelliert werden. In diesem Kapitel soll nun ein Modell a priori mit Hilfe der in Kapitel 5 vorgestellten Strömung für die Anwendung in einer DNS-FDF Simulation zur Beschreibung reagierender Strömungen bei hoher  $Sc$  analysiert werden. Dazu wird zuerst das LMSE Modell vorgestellt und dessen prinzipielle Eignung für diese Methode gezeigt, um anschließend eine Modellierung der subfilter Dissipationsrate der skalaren Varianz zu entwickeln und a priori mit den Daten der turbulenten Kanalströmung zu validieren.

## 7.1 Das Linear Mean Square Estimation Modell für den Mikromischterm

Da die FDF alle Eigenschaften einer PDF besitzt und die lokale und instantane PDF der Zufallsvariable innerhalb der Filterweite darstellt, ist es natürlich, Modelle, die für die Modellierung des Mikromischterms in den PDF Methoden entwickelt wurden, auch für die FDF Methoden zu verwenden. Eines der am weitest verbreitetsten Modelle ist das "linear mean square estimation" (LMSE), auch "interchange by exchange with the mean" (IEM) Modell genannt [11,46,50,72]. Dieses Modell wurde auch in den ersten Formulierungen einer LES-FDF Methode von Gao und O'Brian [18] vorgeschlagen und auch in anderen Arbeiten verwendet [8,55]. Obwohl das LMSE Modell Nachteile<sup>1</sup> besitzt [10,50] zeigten z.B. Mitarai et al. [41], dass durch die Verknüpfung mit einer LES das LMSE Modell durchaus gute Ergebnisse liefern kann. Da diese Verbesserung auf der lokaleren Beschreibung in einer LES im Vergleich zu einer RANS beruht, ist es legitim anzunehmen, dass das LMSE Modell in Verknüpfung mit einer DNS der Strömung gut für die Mischmodellierung geeignet ist. Aus diesem Grund

---

<sup>1</sup>In isotroper Turbulenz relaxiert das LMSE Modell in Kombination mit einer RANS von einer Beta-PDF nicht zu einer Gaussverteilung sondern erhält die Form der Beta-PDF und reduziert nur die skalare Varianz.

wurde das LMSE als Mikromischmodell ausgewählt und die Leistungsfähigkeit im DNS-FDF Kontext soll auch in dieser Arbeit untersucht werden.

Um grundlegende Eigenschaften des LMSE Modells zu zeigen, soll im folgenden ein einfacher Mischprozess zwischen zwei Umgebungen mit den Konzentrationen  $\Phi_1(t=0)$  und  $\Phi_2(t=0)$  und den Wahrscheinlichkeiten<sup>2</sup>  $p_1$  und  $p_2$  betrachtet werden [16]. Benutzt man das LMSE Modell für die Beschreibung der Vermischung zwischen beiden Umgebungen, so relaxiert der Konzentrationswert einer Umgebung  $\Phi_N$  linear zum Mittelwert  $\langle\Phi\rangle$ . Die inverse Zeitkonstante mit der diese Relaxation stattfindet wird als Mischfrequenz  $\Omega_M = 1/t_{LMSE}$  bezeichnet. Die Konzentration in einer Umgebung entwickelt sich also mit

$$\frac{d\Phi_n}{dt} = -\frac{1}{t_{LMSE}} (\Phi_n - \langle\Phi\rangle). \quad (7.1)$$

Dabei ist der Mittelwert

$$\langle\Phi\rangle = p_1\Phi_1(t) + p_2\Phi_2(t), \quad (7.2)$$

wobei bei Verwendung des LMSE Modells der Mittelwert in dem Volumen zeitlich konstant bleibt  $\langle\Phi\rangle = p_1\Phi_1(0) + p_2\Phi_2(0)$ . Die skalare Varianz in dem Volumen berechnet sich zu

$$\langle\Phi'^2\rangle = \langle\Phi^2\rangle - \langle\Phi\rangle^2, \quad (7.3)$$

mit  $\langle\Phi^2\rangle = p_1(\Phi_1)^2 + p_2(\Phi_2)^2$ . Differenziert man Gleichung (7.3) nach der Zeit und beachtet dass der Mittelwert konstant bleibt, so ergibt sich für die zeitliche Entwicklung der skalaren Varianz

$$\frac{d\langle\Phi'^2\rangle}{dt} = -\frac{2}{t_{LMSE}} \langle\Phi'^2\rangle. \quad (7.4)$$

Das LMSE Modell lässt den Mittelwert unverändert und baut mit der Zeitkonstante  $2/t_{LMSE}$  die skalare Varianz ab. Damit hat die Wahl der Mischfrequenz auf die Entwicklung des

---

<sup>2</sup>Welche hier genau den Volumenanteilen gleichgesetzt werden können



Mittelwerts keinen Einfluss. Da die skalare Varianz durch die Dissipationsrate  $\epsilon_\Phi$  abgebaut wird, ergibt sich aus dieser einfachen Betrachtung eine Definition für die Mischfrequenz:

$$\frac{1}{t_{LMSE}} = \Omega_M = \frac{\epsilon_\Phi}{2 \langle \Phi'^2 \rangle} . \quad (7.5)$$

In Abschnitt 7.1.1 soll zuerst auf die genaue Definition der Mischfrequenz in den FDF Methoden eingegangen werden um dann im Abschnitt 7.1.2 die Eignung des LMSE Modells für den DNS-FDF Ansatz a priori in der DNS der Kanalströmung zu untersuchen. Dabei wird die Mischfrequenz zuerst noch exakt aus der DNS bestimmt und anschließend untersucht, ob bestimmte Terme in der Definition der Mischfrequenz vernachlässigt werden können. Aufgrund der unterschiedlichen FDF Transportgleichungen (6.8) und (6.9) ergibt sich auch eine unterschiedliche Definition der Mischfrequenz und dementsprechend werden auch beide Definitionen a priori untersucht.

### 7.1.1 Die Mischfrequenz des LMSE Modells in der DNS-FDF Methode

Aus der Herleitung der FDF Transportgleichung resultieren zwei Schreibweisen die direkt in eine unterschiedliche Formulierung bzw. Definition der Mischfrequenz  $\Omega_M$  führen. Eine Schreibweise ist die Aufspaltung der konditionierten Diffusion in einen Anteil aus dem gefilterten und einen Anteil aus dem fluktuierenden Wert (Gleichung 6.9). Der Mikromischterm aus dem gefilterten Anteil ist geschlossen, der Mikromischterm aus der konditionierten, fluktuierenden Diffusion muss modelliert werden. Die zweite Schreibweise benutzt die Aufspaltung nach Colucci et al. [8] und formuliert die konditionierte Diffusion mit einem Term, der die räumliche Diffusion der FDF beschreibt, und einem Term, der die totale Dissipation des Skalars beschreibt (Gleichung 6.8). Hier muss das LMSE Modell die totale Dissipation modellieren. Im Folgenden wird nun für beide Schreibweisen eine Definition der Mischfrequenz  $\Omega_M$  hergeleitet.

#### Modellierung der konditionierten fluktuierenden Diffusion

In der Formulierung (6.9) muss die konditionierte, fluktuierende Diffusion modelliert werden. Dazu wird das LMSE Modell verwendet. Die gesamte konditionierte Diffusion wird also geschrieben als:

$$\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[ \overline{-\Gamma \frac{\partial^2 \Phi_\alpha}{\partial x_i^2}} \Big| \Psi \right] P_L = -\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[ \left( \Gamma \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i^2} - \Omega_M (\Psi_\alpha - \bar{\Phi}_\alpha) \right) P_L \right] . \quad (7.6)$$

$\Omega_M$  ist die Mischfrequenz und beschreibt die Zeitkonstante mit welcher der Skalarwert zu dem lokalen Mittelwert driftet. Eine Definition (bzw. Interpretation) von  $\Omega_M$  erhält man aus der Betrachtung der Momente von Gleichung (7.6). Das erste Moment erhält man aus der Multiplikation von Gleichung (7.6) mit  $\Psi$  und anschließender Integration über den Zustandsraum  $\int d\Psi$ . Das zweite Moment respektive durch die Multiplikation mit  $\Psi^2$ . Das erste Moment von Gleichung (7.6) lautet

$$\Gamma \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i^2} = \Gamma \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i^2}. \quad (7.7)$$

Unabhängig von der Wahl der Mischfrequenz wird mit dem LMSE Modell der gefilterte Skalarwert immer korrekt transportiert. Das zweite Moment lautet

$$2\Gamma \overline{\Phi_\alpha \frac{\partial^2 \Phi_\alpha}{\partial x_i^2}} = 2\Gamma \bar{\Phi}_\alpha \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i^2} - 2\Omega_M \left( \overline{\Phi_\alpha^2} - \bar{\Phi}_\alpha^2 \right). \quad (7.8)$$

Gleichung (7.8) kann umgeformt werden zu:

$$\Gamma \frac{\partial^2 \overline{\Phi_\alpha^2}}{\partial x_i^2} - 2\Gamma \overline{\frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_i}} = \Gamma \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_\alpha^2}{\partial x_i^2} - 2\Gamma \frac{\partial \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i} - 2\Omega_M \overline{\Phi_\alpha^2}. \quad (7.9)$$

Was schließlich ergibt:

$$\Gamma \frac{\partial^2 \overline{\Phi_\alpha'^2}}{\partial x_i^2} - 2\Gamma \overline{\frac{\partial \Phi_\alpha'}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_\alpha'}{\partial x_i}} = -2\Omega_M \cdot \overline{\Phi_\alpha'^2} \quad (7.10)$$

Die Mischfrequenz ist dadurch definiert als:

$$\Omega_M = \frac{1}{2\overline{\Phi_\alpha'^2}} \left( -\Gamma \frac{\partial^2 \overline{\Phi_\alpha'^2}}{\partial x_i^2} + 2\Gamma \overline{\frac{\partial \Phi_\alpha'}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_\alpha'}{\partial x_i}} \right). \quad (7.11)$$

Mit dieser Definition der Mischfrequenz wird also auch das zweite Moment des Skalars korrekt transportiert. Der erste Term auf der rechten Seite entspricht der molekularen Diffusion

von skalarer Varianz und der zweite Term der Dissipation von skalarer Varianz. Bei Vernachlässigung der molekularen Diffusion, was im RANS Kontext bei hohen Re gerechtfertigt ist [16], ist die Mischfrequenz bestimmt zu:

$$\Omega_M = \frac{\epsilon_\Phi}{2\overline{\Phi_\alpha'^2}}, \text{ mit } \epsilon_\Phi = 2\Gamma \overline{\frac{\partial\Phi_\alpha'}{\partial x_i} \frac{\partial\Phi_\alpha'}{\partial x_i}}. \quad (7.12)$$

Diese Definition der Mischfrequenz entspricht den gängigen Definitionen im RANS-Kontext [16]. Ob die Vernachlässigung der molekularen Diffusion hier anwendbar ist, wird in Kapitel 7.1.2 untersucht.

### Modellierung der konditionierten totalen Dissipation

Für die Modellierung des zweiten Terms auf der rechten Seite von Gleichung (6.8), also der konditionierten Dissipation, schlagen Colucci et al. das LMSE Modell vor:

$$\frac{\partial^2}{\partial\Psi_\alpha\partial\Psi_\beta} \left[ \overline{\Gamma \left( \frac{\partial\Phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial\Phi_\beta}{\partial x_i} \middle| \vec{\Psi} \right) P_L} \right] = -\frac{\partial}{\partial\Psi_\alpha} [\Omega_M (\Psi_\alpha - \overline{\Phi_\alpha}) P_L]. \quad (7.13)$$

Damit ergibt sich die FDF-Transportgleichung zu

$$\frac{\partial P_L}{\partial t} + u_i \frac{\partial P_L}{\partial x_i} = \Gamma \frac{\partial^2 P_L}{\partial x_i^2} + \frac{\partial}{\partial\Psi_\alpha} [\Omega_M (\Psi_\alpha - \overline{\Phi_\alpha}) P_L] - \frac{\partial\omega(\Psi_\alpha)P_L}{\partial\Psi_\alpha}. \quad (7.14)$$

Die konditionierte Diffusion wird demnach modelliert durch:

$$\frac{\partial}{\partial\Psi_\alpha} \left[ \overline{-\Gamma \frac{\partial^2\Phi_\alpha}{\partial x_i^2} \middle| \Psi} P_L \right] = \Gamma \frac{\partial^2 P_L}{\partial x_i^2} + \frac{\partial}{\partial\Psi_\alpha} [\Omega_M (\Psi_\alpha - \overline{\Phi_\alpha}) P_L]. \quad (7.15)$$

Das erste und zweite Moment von Gleichung (7.15) wird wieder zur Bestimmung der Mischfrequenz  $\Omega_M$  herangezogen. Das erste Moment von Gleichung (7.15) zeigt die Auswirkung der konditionierten Diffusion (linke Seite) und der Modellierung derselben (rechten Seite) auf den gefilterten Skalar:

$$\Gamma \frac{\partial^2 \overline{\Phi_\alpha}}{\partial x_i^2} = \Gamma \frac{\partial^2 \overline{\Phi_\alpha}}{\partial x_i^2}. \quad (7.16)$$

Das zweite Moment von Gleichung (7.15) lautet:

$$2\overline{\Gamma\Phi_\alpha\frac{\partial^2\Phi_\alpha}{\partial x_i^2}} = \Gamma\frac{\partial^2\overline{\Phi_\alpha^2}}{\partial x_i^2} - 2\Omega_M\left(\overline{\Phi_\alpha^2} - \overline{\Phi_\alpha}^2\right). \quad (7.17)$$

Diese Gleichung läßt sich umformen zu:

$$\Gamma\frac{\partial^2\overline{\Phi_\alpha^2}}{\partial x_i^2} - 2\Gamma\frac{\partial\overline{\Phi_\alpha}}{\partial x_i}\frac{\partial\overline{\Phi_\alpha}}{\partial x_i} = \Gamma\frac{\partial^2\overline{\Phi_\alpha^2}}{\partial x_i^2} - 2\Omega_M\overline{\Phi_\alpha^2}. \quad (7.18)$$

Benutzt man das LMSE Modell nach Colucci et. al. wird das erste Moment, der gefilterte Skalarwert, unabhängig von der Wahl der Mischfrequenz  $\Omega_M$  korrekt transportiert. Wählt man  $\Omega_M$  wie in Gleichung (7.18) bestimmt zu

$$\Omega_M = \frac{\epsilon_\Phi}{2\overline{\Phi_\alpha'^2}} \quad \text{mit} \quad \epsilon_\Phi = 2\Gamma\frac{\partial\overline{\Phi_\alpha}}{\partial x_i}\frac{\partial\overline{\Phi_\alpha}}{\partial x_i} \quad (7.19)$$

dann wird durch das Modell auch das zweite Moment, die totale Varianz, korrekt transportiert und der Mikromischterm entspricht genau der Dissipation der totalen Varianz.

### Zusammenfassung

Bei beiden Ansätzen wird der Mittelwert der FDF korrekt transportiert, da dieser durch den Mikromischterm nicht verändert wird. Der Mikromischterm baut nur die Varianz der FDF ab, wohingegen der Mittelwert der FDF durch andere Prozesse, wie z. B. durch Konvektion, durch den Senkenterm und durch die gefilterte Diffusion verändert wird. Das zweite Moment der FDF, also die Varianz, wird bei beiden Ansätzen korrekt transportiert, solange die Mischfrequenz der entsprechenden Definition entspricht. Die höheren Momente der FDF werden durch die Modellierung mittels des LMSE Modells nicht beachtet und wie weit diese für die Beschreibung des Mikromischens mit der DNS-FDF Methode von Bedeutung sind, wird in Kapitel 7.1.2 untersucht. Die Unterschiede in der Aufspaltung sind grundlegender Natur. So spaltet die Schreibweise (6.8) die konditionierte Diffusion in einen im physikalischen Raum wirkenden Anteil, der die räumliche Diffusion der FDF beschreibt, und einen im Zustandsraum wirkenden Anteil auf:

$$-\frac{\partial}{\partial\Psi_\alpha}\left[\overline{\Gamma\frac{\partial^2\Phi_\alpha}{\partial x_i^2}}\middle|\Psi\ P_L\right] = \underbrace{\Gamma\frac{\partial^2 P_L}{\partial x_i^2}}_{\text{räumliche Diffusion der FDF}} - \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial\Psi_\alpha\partial\Psi_\beta}\left[\overline{\Gamma\frac{\partial\Phi_\alpha}{\partial x_i}\frac{\partial\Phi_\beta}{\partial x_i}}\middle|\Psi\ P_L\right]}_{\text{kond. totale Dissipation im Zustandsraum}}. \quad (7.20)$$

Die Formulierung (6.9) trennt hingegen zwischen gefilterter und konditionierter subfilter Diffusion, wobei beide Terme im Zustandsraum der FDF wirken.

$$-\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[ \overline{\Gamma \frac{\partial^2 \Phi_\alpha}{\partial x_i^2}} \middle| \Psi \right. P_L \left. \right] = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[ \Gamma \frac{\partial^2 \bar{\Phi}_\alpha}{\partial x_i^2} P_L \right]}_{\text{gefilterte Diffusion}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[ \overline{\Gamma \frac{\partial^2 \Phi'_\alpha}{\partial x_i^2}} \middle| \Psi \right. P_L \left. \right]}_{\text{konditionierte sub- filter Diffusion}}. \quad (7.21)$$

Dabei muss beachtet werden, dass die gefilterte räumliche Diffusion nicht durch die FDF selbst beschrieben werden kann, da mit dieser bekanntlich ja keine "two point - one time" Größen bestimmt werden können. Im ersteren Fall beschreibt das LMSE Modell also die gesamte Dissipation der skalaren Varianz, im zweiten Fall die Diffusion und Dissipation durch die subfilter Fluktuationen. In beiden Fällen wird durch das LMSE Modell eine unterschiedliche Größe modelliert was sich in der unterschiedlichen Definition der Mischfrequenz widerspiegelt. Im Kapitel 7.1.2 wird gezeigt, dass im Limit von hohen  $Sc$  diese beiden Formulierungen ineinander übergehen, da die unterschiedlich definierten Mischfrequenzen ineinander übergehen und im Limit von hohen  $Sc$  die Diffusion gänzlich durch die subfilter Fluktuationen bestimmt ist.

### 7.1.2 A priori Analyse des LMSE-Modells in der DNS-FDF Methode

Die a priori Analyse des LMSE Modells mit Hilfe der DNS Daten der turbulenten Kanalströmung (siehe Kapitel 5) soll folgende Fragen klären:

- Kann das LMSE Modell für die DNS-FDF Methode benutzt werden?
- Kann die molekulare Diffusion der skalaren Varianz bei der Bestimmung der Mischfrequenz  $\Omega_M$  vernachlässigt werden?
- Kann das LMSE Modell sowohl für die Modellierung der konditionierten fluktuierenden Diffusion als auch für die Modellierung der konditionierten totalen Dissipation verwendet werden?
- Welche Unterschiede in der Modellierung ergeben sich aus der unterschiedlichen Definition der Mischfrequenz im Limit von hohen  $Sc$ ?
- Wie verändert sich die totale Dissipation im Verhältnis zur turbulenten Dissipation mit steigender  $Sc$  und kann die räumliche Diffusion der FDF bzw. die Diffusion durch das gefilterte Skalarfeld vernachlässigt werden?

Als Grundlage der a priori Analyse dient die turbulente Kanalströmung bei  $Re_\tau = 180$  und  $Sc = 3, 10, 25$  und  $49$ . Die Parameter, numerischen Verfahren und die Durchführung dieser Simulationen sind ausführlich in Kapitel 5 beschrieben. Das Strömungsgitter bei  $Sc = 3$  (Gitter **A**-grob, 1-D Punktezahl  $\approx N_{Ag}$ ) ist ausreichend für eine DNS des Strömungsfeldes. Daher wird dieses Gitter als Gitter angesehen, dass das Kolmogorov Längenmaß noch auflöst. Alle Skalen zwischen dieser Auflösung und der feinen Auflösung für das Skalarfeld bei

hoher Schmidt Zahl werden im Rahmen der DNS-FDF Methode als Subgitterfluktuationen betrachtet. Mit anderen Worten würde die angestrebte DNS-FDF Methode eine DNS auf dem groben Gitter  $\mathbf{A}$  verwenden, um darauf die FDF-Transportgleichung für den passiven Skalartransport mit der Monte-Carlo Methode für alle  $Sc$  zu lösen. In der Monte-Carlo Methode wird eine große Anzahl stochastischer Partikel mit der Strömung transportiert. Die Transportgleichungen für die, durch die Partikel repräsentierten Zufallsgrößen, sind dabei die in Kapitel 6.2.5 hergeleiteten Ito-SDE's. Benutzt man das LMSE Modell für die konditionierte, fluktuierende Diffusion in Gleichung (6.35) und vernachlässigt für die a priori Analyse den Reaktionsterm, so ergeben sich die Transportgleichungen für Ort und Skalar zu:

$$dX_i^+(t) = u_i(X_i^+, t)dt, \quad (7.22)$$

$$d\Psi^+(t) = \Gamma \frac{\partial^2 \bar{\Phi}}{\partial x_i^2} dt - \Omega_M (\Psi^+ - \bar{\Phi}) dt. \quad (7.23)$$

Gleichung (7.22) entspricht genau der Transportgleichung für ein masseloses Partikel (4.27) das mit der Strömung konvektiert wird. Gleichung (7.23) beschreibt die Entwicklung des Skalars entlang dieser Bahn. Das LMSE Modell beschreibt dabei die fluktuierende, konditionierte Diffusion. In der Formulierung (6.34) hingegen lauten die Transportgleichungen

$$dX_i^+(t) = u_i(X_i^+, t)dt + \sqrt{2\Gamma}dW_i, \quad (7.24)$$

$$d\Psi^+(t) = -\Omega_M (\Psi^+ - \bar{\Phi}) dt. \quad (7.25)$$

Auch hier entspricht Gleichung (7.24) der Transportgleichung für ein masseloses Partikel, die aber noch mit einem stochastischen Term gestört wird. In der Entwicklungsgleichung für den Skalar (7.25) steht das LMSE Modell für die totale Dissipation. Für die a priori Analyse des LMSE Modells wurden in den DNS der turbulenten Kanalströmung daher bis zu 6400 Lagrange Bahnen in der Ebene  $x = 0.1175$  und gleichverteilt in der  $y$ - $z$  Ebene initialisiert<sup>3</sup>. Die Bahnen bzw. Positionen  $\vec{X}^+(t, \vec{Y})$  folgen der Differentialgleichung (4.27) bzw. (7.22). Entlang der Lagrange Bahnen wurden folgende Größen ausgewertet:

- Die Konzentration entlang der Bahn

$$\Psi^+(t) = \Phi(\vec{X}^+, t). \quad (7.26)$$

<sup>3</sup>Die  $y$ -Koordinaten laufen zwischen 0.04 und 3.16, die  $z$ -Koordinaten zwischen 0.025 und 1.975

- Die gefilterte Konzentration entlang der Bahn

$$\bar{\Phi}^+(t) = \bar{\Phi}(\bar{X}^+, t) . \quad (7.27)$$

- Die Subfilterfluktuation entlang der Bahn

$$\Phi'^+(t) = (\Phi(t) - \bar{\Phi}(t))^+ . \quad (7.28)$$

- Die gefilterte skalare Varianz entlang der Bahn

$$\overline{\Phi'^{+2}}(t) = \overline{(\Phi(t) - \bar{\Phi}(t))^2}^+ . \quad (7.29)$$

- Die gefilterte Dissipation der skalaren Varianz entlang der Bahn

$$\epsilon_{\Phi'}^+ = 2\Gamma \frac{\overline{\partial\Phi' \partial\Phi'^+}}{\partial x_i \partial x_i} . \quad (7.30)$$

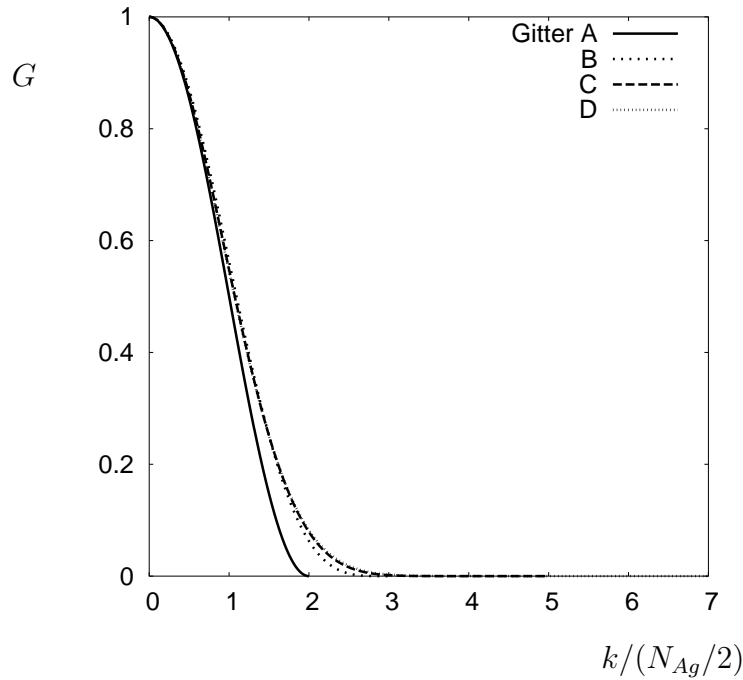
- Die subfilter Diffusion der Fluktuation entlang der Bahn

$$J'^+ = \Gamma \frac{\partial^2 \Phi'^+}{\partial x_i^2} . \quad (7.31)$$

Dazu wurden die Größen erst auf dem Eulergitter der DNS berechnet und dann auf die Partikelposition  $X^+(t)$  interpoliert.

Die Unterscheidung zwischen gefilterten und subfilter Größen wird über eine explizite Filteroperation erreicht. Im Spektralraum betrachtet ist die maximale darstellbare Wellenzahl bei Gitter **A**-grob  $k_{Ag}/(N_{Ag}/2) = 1$  und relativ dazu bei Gitter **A**-fein  $k_{Af}/(N_{Ag}/2) = 2$ , bei Gitter **B**  $k_B/(N_{Ag}/2) = 3$ , bei Gitter **C**  $k_C/(N_{Ag}/2) = 5$  und bei Gitter **D**  $k_D/(N_{Ag}/2) = 7$ . Für die a priori Analyse wird zwischen den, auf dem Strömungsgitter **A**-grob aufgelösten Größen  $\bar{Q}$ , und den, auf diesem Gitter nicht mehr aufgelösten Fluktuationen  $Q'$  zwischen dem Kolmogorov und dem entsprechenden Batchelor Maß, unterschieden. Diese Aufspaltung der Skalen wird mit dem Top-Hat Filter (4.28) und der Differenz (4.29) durchgeführt. Der Filter wird sukzessive in alle drei Raumrichtungen angewandt. Da die Gitter bei den höheren Schmidt Zahlen gegenüber Gitter **A**-grob um den Faktor 2, 3, 5 und 7 feiner sind, muss die Filteroperation wiederholt angewandt werden um bei den verschiedenen Simulationen die gleichen gefilterten Skalen zu erhalten. So wurde bei Gitter **A** der Filter einmal, bei den höheren Schmidt Zahlen 2, 6 und 12 mal angewandt. Dadurch erreicht man Filtertransferfunktionen welche auf dem entsprechenden Gitter relativ zu Gitter **A**-grob sehr ähnliche Übertragungseigenschaften besitzen. Abbildung 7.1 zeigt die entsprechenden Transferfunktionen.

In den niedrigen Wellenzahlbereichen  $k < 1$  wird damit eine gute Übereinstimmung erreicht. Geringe Abweichungen in den Transferfunktionen sind bei Wellenzahlen zwischen  $1 < k < 3$  zu erkennen. Integriert man die Transferfunktion  $G(k)$  über die normierten Wellenzahlen, so erhält man ein Maß für die Relation der gefilterten Größen zueinander. Auf Gitter **A**



**Abbildung 7.1:** Filtertransferfunktionen der Filteroperationen auf den entsprechenden Gittern.  $N_{Ag}$  ist die Anzahl der Gitterpunkte (in einer Dimension) auf Gitter **A**-grob.  $k/(N_{Ag}/2) = 1$  entspricht der maximalen, darstellbaren Wellenzahl auf Gitter **A**-grob.

entspricht die Integration  $\int G(k)dk = 1.0$ , auf Gitter **B** und **C** 1.13 und auf Gitter **D** 1.14.

### Analyse des LMSE Ansatzes für die Modellierung der konditionierten, fluktuierenden Diffusion

Bei der Aufspaltung der konditionierten Diffusion in aufgelösten und fluktuierenden Anteil (Gleichung 6.9) und unter Verwendung des LMSE Modells ist die Mischfrequenz in Gleichung (7.11) bestimmt. Die Ito-SDE für die Zufallsgröße  $\Psi^+(t)$  eines Partikels ist, bei Vernachlässigung der chemischen Reaktion, Gleichung (7.23). Das LMSE Modell steht dabei für die konditionierte, fluktuierende Diffusion welche auf das stochastische Partikel wirkt:

$$\overline{\Gamma \frac{\partial^2 \Phi'^+}{\partial x_i^2} \Big| \Psi^+ dt} = -\Omega_M (\Psi^+ - \bar{\Phi}^+) dt . \quad (7.32)$$

Die gefilterte, konditionierte Diffusion des fluktuierenden Skalars stellt die Auswirkungen aller "Diffusionsereignisse" innerhalb der Filterweite dar, welche bei dem bestimmten Skalarwert  $\Psi$  stattfinden. Es ist klar, dass, wenn die auf ein stochastisches Partikel zu einem



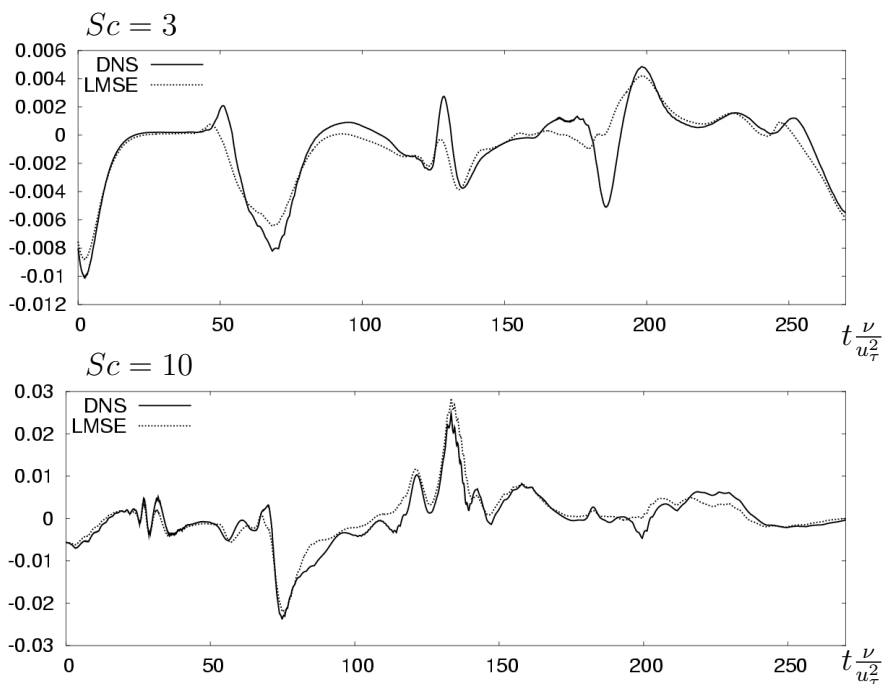
Zeitpunkt modelliert mit der tatsächlich wirkenden Diffusion unter der Benutzung der exakten Mischfrequenz nach Gleichung (7.11) übereinstimmen

$$\Gamma \frac{\partial^2 \Phi'^+}{\partial x_i^2} = -\Omega_M (\Psi^+ - \bar{\Phi}^+), \quad (7.33)$$

auch Gleichung (7.32) korrekt ist, da innerhalb der Filterweite die Mischfrequenz konstant bleibt und die konditionierte Filterung Gleichung (7.33) direkt in Gleichung (7.32) überführt.

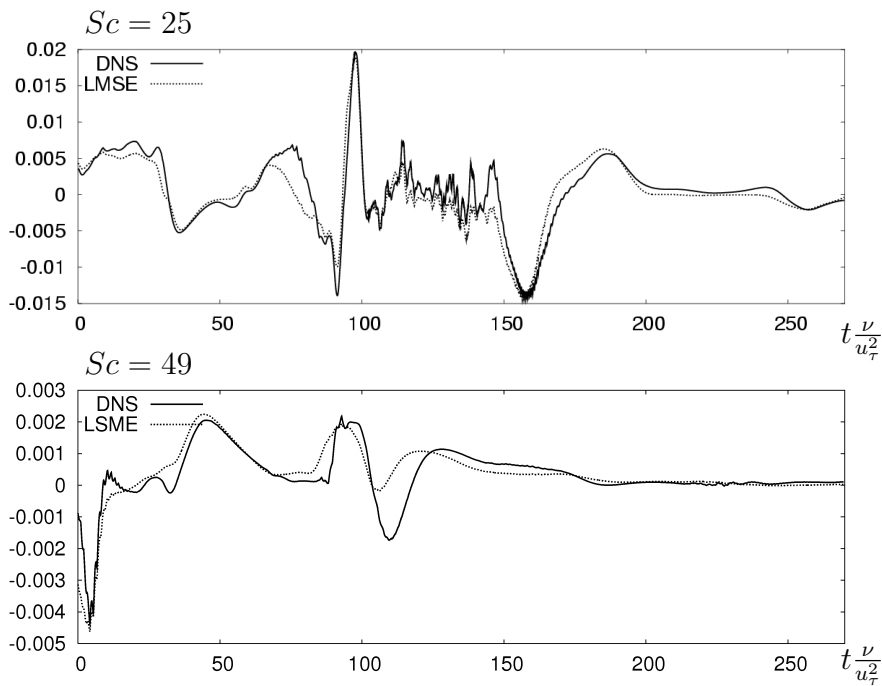
### Grundsätzliche Eignung des LMSE Modells

Um nun die grundsätzliche Eignung des LMSE Modells für den DNS-FDF Ansatz mit der Monte-Carlo Methode nach Gleichung (7.22) und (7.23) zu untersuchen, genügt es Gleichung (7.33) entlang der Lagrange'schen Bahnen zu analysieren.



**Abbildung 7.2:** Zeitlicher Verlauf der linken (DNS) und rechten Seite (LMSE) von Gleichung (7.33) entlang ausgewählter Lagrange Bahnen bei  $Sc = 3$  und  $Sc = 10$ .

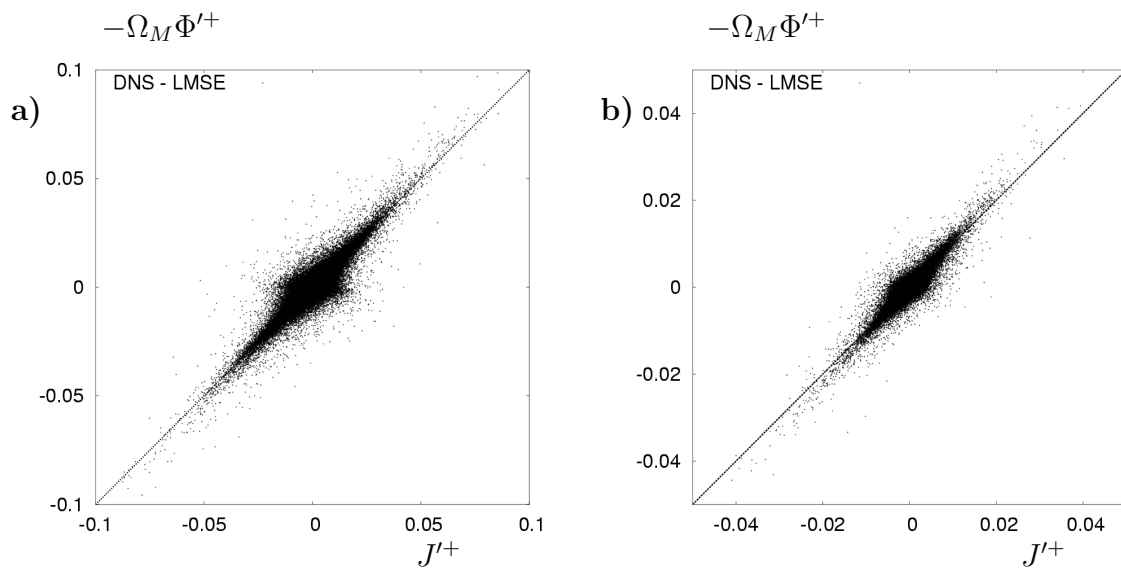
Der tatsächliche und modellierte, zeitliche Verlauf der fluktuierenden Diffusion (linke und rechte Seite von Gleichung 7.33) entlang ausgewählter Lagrange Bahnen sind in den Abbildungen 7.2 und 7.3 bei unterschiedlichen  $Sc$  dargestellt. Dabei wurde die Mischfrequenz nach Gleichung (7.11) aus der DNS bestimmt und entspricht somit der exakten Definition. Der instantane Verlauf und die Dynamik der fluktuierenden Diffusion entlang dieser Bahnen wird durch das Modell sehr gut wiedergegeben. Um sämtliche Stichproben entlang aller



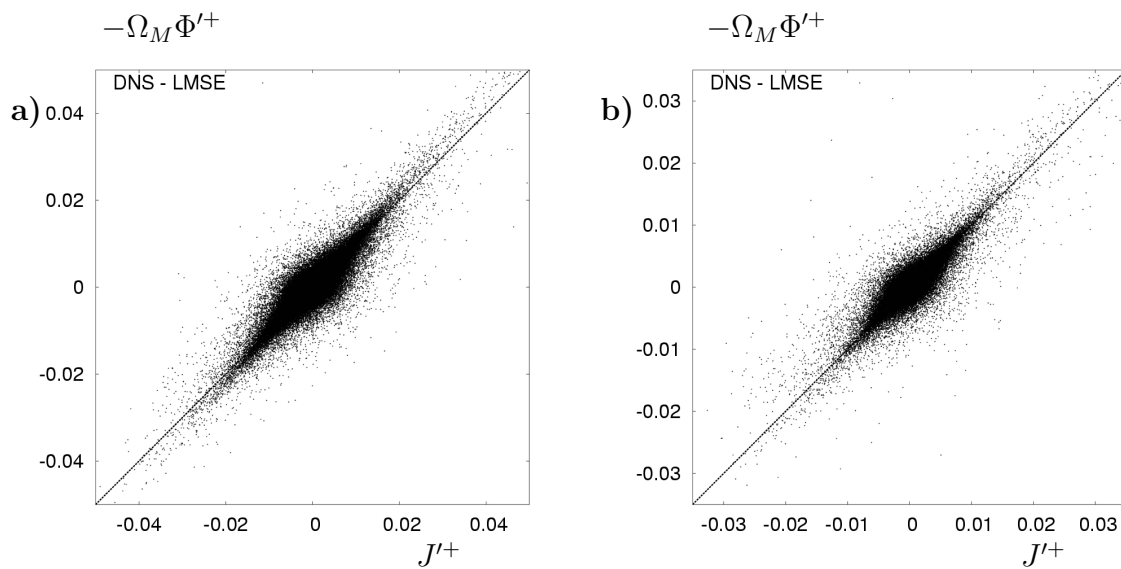
**Abbildung 7.3:** Zeitlicher Verlauf der linken (DNS) und rechten Seite (LMSE) von Gleichung (7.33) entlang ausgewählter Lagrange Bahnen bei  $Sc = 25$  und  $Sc = 49$ .

Bahnen zur Analyse des LMSE Modells heran zu ziehen, zeigen Abbildungen 7.4 und 7.5 die Scatterplots der Diffusion durch die subfilter Fluktuationen und den Ansatz mit dem LMSE Modell nach Gleichung (7.33). Dabei bilden die linke und die rechte Seite dieser Gleichung jeweils ein Wertepaar. Die Stichproben der Wertepaare wurden auf den Bahnen zu jedem Zeitschritt gezogen. Um Wandeinflüsse zu vermeiden wurden nur Partikelpositionen in Betracht gezogen die sich im Inneren der Kanalströmung zwischen  $0.2 < z/h < 1.8$  befanden.

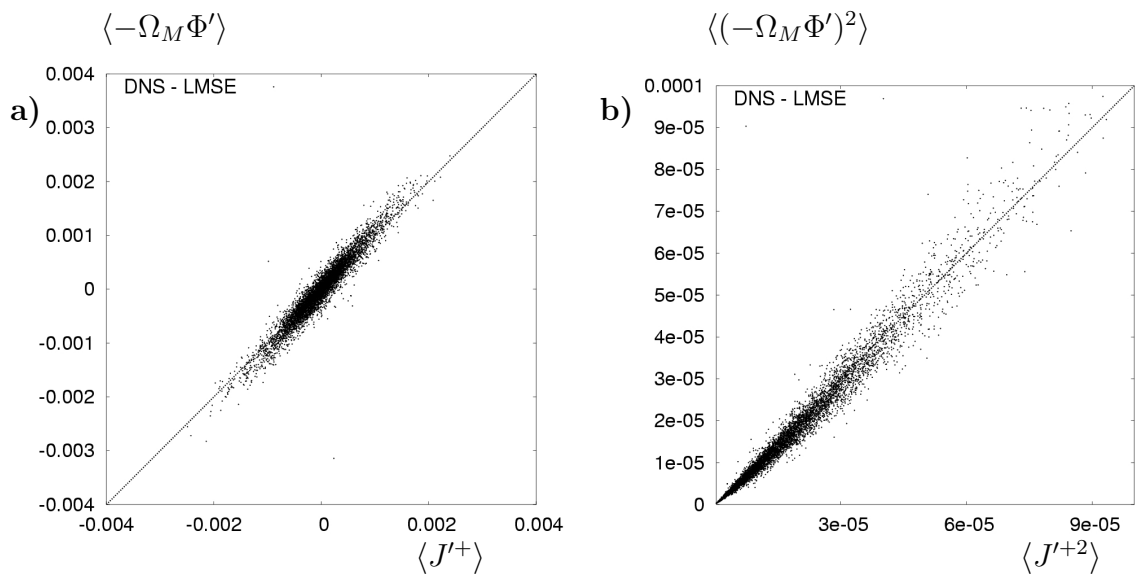
Alle Abbildungen zeigen eine sehr starke Korrelation. Der Korrelationskoeffizient beträgt 0.9 bei  $Sc = 3$  und  $Sc = 10$ , 0.86 bei  $Sc = 25$  und 0.81 bei  $Sc = 49$ . Dabei steigt der Korrelationskoeffizient mit Erhöhung der Stichprobenanzahl ( $2.2 \times 10^6$  Stichproben bei  $Sc = 3$ ,  $0.5 \times 10^6$  Stichproben bei  $Sc = 49$ ). Die eingezeichnete Winkelhalbierende verdeutlicht die gute instantane Abbildung der fluktuierenden Diffusion mittels des LMSE Modells.



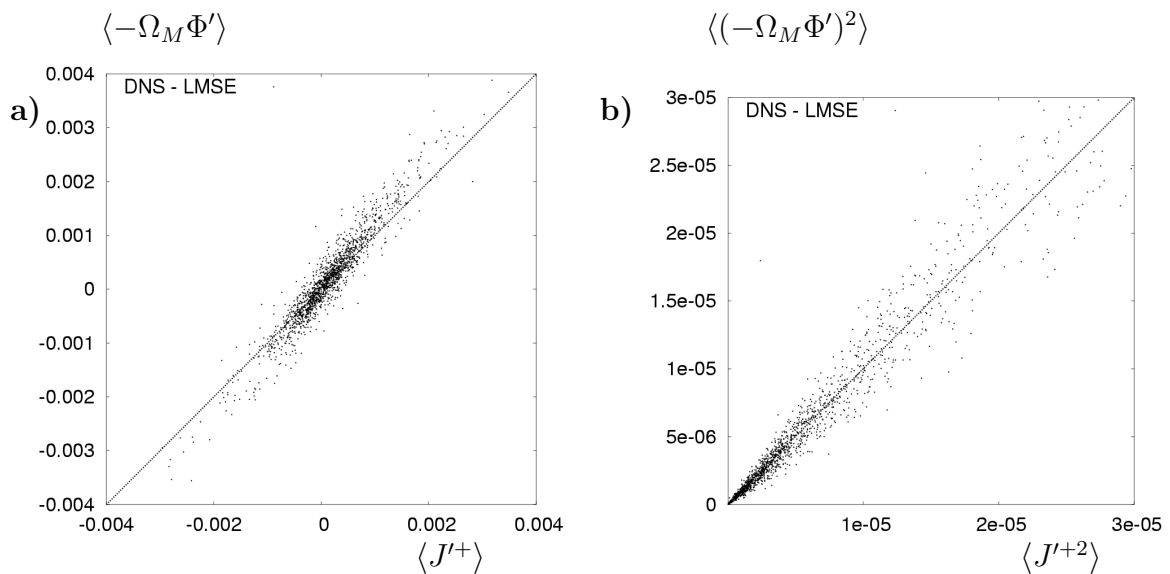
**Abbildung 7.4:** Scatterplot der Gleichung (7.33) und Winkelhalbierende bei  $Sc = 3$  (a) und  $Sc = 10$  (b).



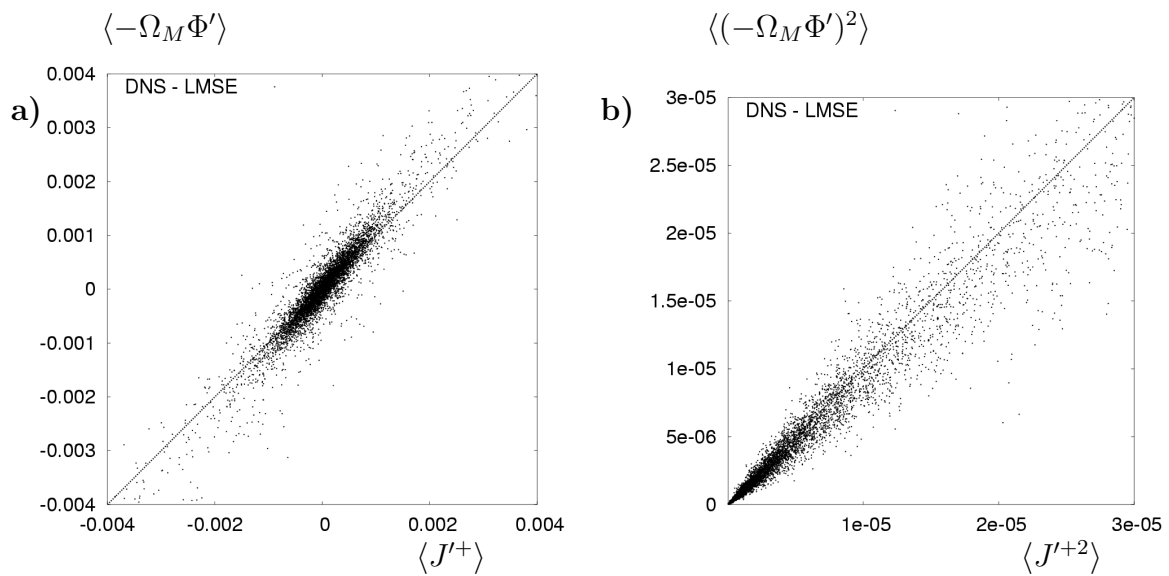
**Abbildung 7.5:** Scatterplot der Gleichung (7.33) und Winkelhalbierende bei  $Sc = 25$  (a) und  $Sc = 49$  (b).



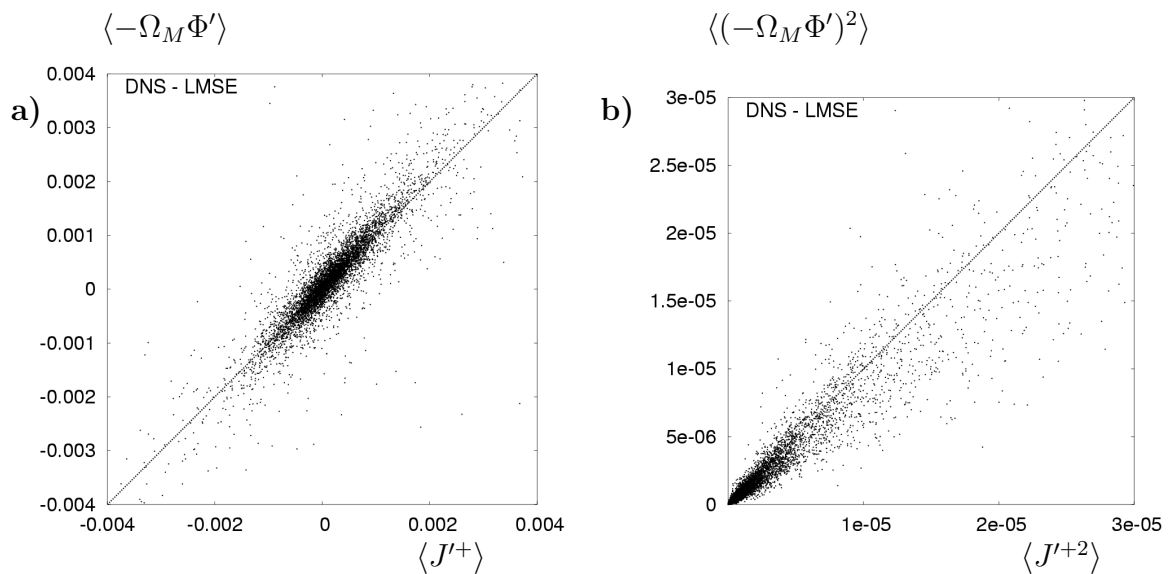
**Abbildung 7.6:** Scatterplot des Mittelwerts (a) und der Varianz (b) von Gleichung (7.33) bei  $Sc = 3$ , Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen



**Abbildung 7.7:** Scatterplot des Mittelwerts (a) und der Varianz (b) von Gleichung (7.33) bei  $Sc = 10$ , Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen



**Abbildung 7.8:** Scatterplot des Mittelwerts (a) und der Varianz (b) von Gleichung (7.33) bei  $Sc = 25$ , Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen

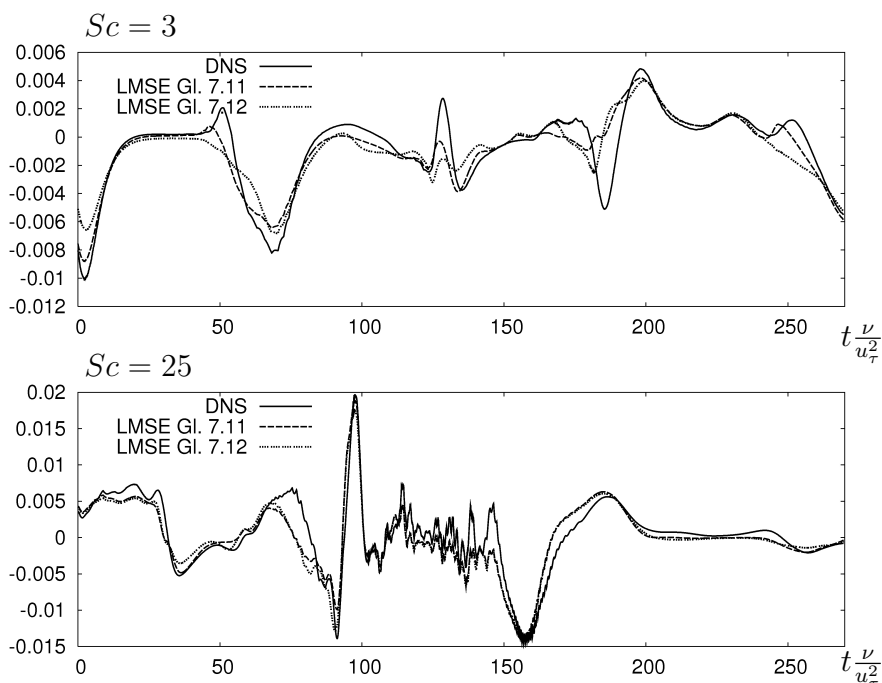


**Abbildung 7.9:** Scatterplot des Mittelwerts (a) und der Varianz (b) von Gleichung (7.33) bei  $Sc = 49$ , Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen

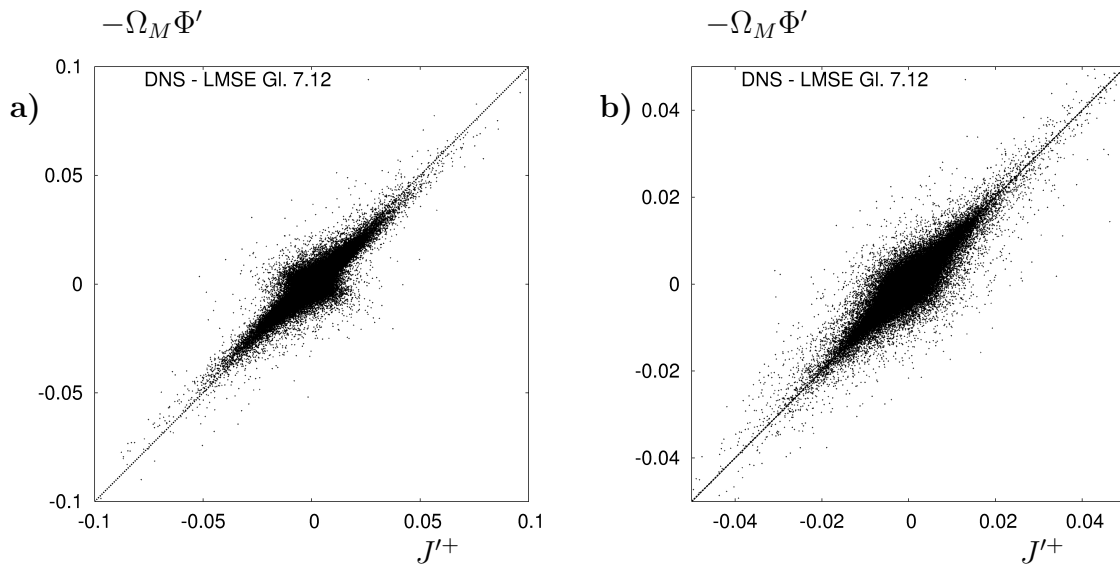
Eine weitere Überprüfung der Modellierung kann durch Bildung der Statistik entlang der Lagrange Bahnen vorgenommen werden. Für jede Bahn wurde eine Ensemble Mittelung aller Stichproben dieser Bahn durchgeführt und damit Mittelwert und Varianz der linken und der rechten Seite von Gleichung (7.33) gebildet. Die linke und rechte Seite ergeben für jede Bahn ein Wertepaar. Diese werden als Scatterplot der Mittelwerte und Varianzen in den Abbildungen 7.6 mit 7.9 bei den verschiedenen  $Sc$  dargestellt sind. Bei einer unendlich langen Bahn müsste sich der Mittelwert zu Null ergeben, da das Partikel jeden Punkt im Kanal durchfahren würde. Aufgrund der endlichen Stichprobenzahl ist dies hier nicht der Fall. Sowohl der Mittelwert als auch die Varianz zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen dem LMSE Modell und der fluktuierenden Diffusion. Das LMSE Modell für die konditionierte Diffusion der Skalarfluktuationen mit der Definition der Mischfrequenz nach Gleichung (7.11) ist damit in der Lage zusätzlich zu dem ersten und zweiten Moment des Skalars auch das instantane Verhalten des Skalars wiederzugeben. Der Einfluss der höheren Momente, die durch das LMSE Modell nicht berücksichtigt werden, auf das Verhalten der fluktuierenden Diffusion ist daher gering.

### Einfluss der molekularen Diffusion der skalaren Varianz auf die Mischfrequenz

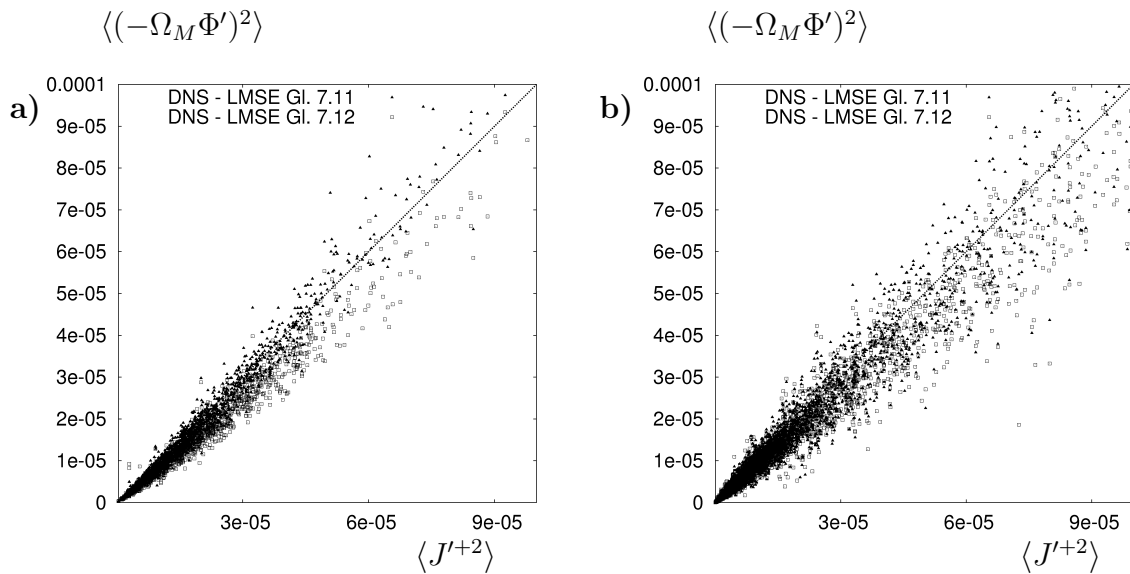
Die Definition der Mischfrequenz nach Gleichung (7.12) wird sehr häufig verwendet [16,51,55] und vernachlässigt die molekulare Diffusion der skalaren Varianz. Bei hohen Reynoldszahlen oder bei statistisch homogenen Skalarfeldern sowie im RANS Kontext ist dies gerechtfertigt [16].



**Abbildung 7.10:** Zeitlicher Verlauf der linken (DNS) und rechten Seite (LMSE) von Gleichung (7.33) entlang einer ausgewählten Lagrange Bahn bei  $Sc = 3$  und  $Sc = 25$ , mit und ohne molekularer Diffusion skalärer Varianz in der Definition der Mischfrequenz



**Abbildung 7.11:** Scatterplot der Gleichung (7.33) und Winkelhalbierende bei  $Sc = 3$  (a) und  $Sc = 25$  (b). Definition von  $\Omega_M$  nach Gleichung (7.12).



**Abbildung 7.12:** Scatterplot der Varianz von Gleichung (7.33) bei  $Sc = 3$  (a) und  $Sc = 25$  (b), Statistikbildung entlang der Lagrange-Bahnen. Schwarze Dreiecke mit molekularer Diffusion, weiße Quadrate ohne molekularer Diffusion

Die Abbildungen 7.10 mit 7.12 zeigen den Vergleich zwischen dem LMSE Modell mit unterschiedlicher Mischfrequenz, einmal definiert mit Einbeziehung der molekularen Diffusion der skalaren Varianz nach Gleichung (7.11) und einmal definiert mit vernachlässigter molekularer Diffusion nach Gleichung (7.12). Der zeitliche Verlauf sowie die Scatterplots zeigen bei der unterschiedlichen Berechnung der Mischfrequenz nur geringe Unterschiede. Diese werden mit steigender Schmidt Zahl geringer, was vor allem in den Scatterplots der Varianzen im Vergleich zwischen den beiden  $Sc$  (Abbildung 7.12a und b) gut sichtbar wird. Ist bei  $Sc = 3$

die Varianz mit der Definition von  $\Omega_M$  nach Gleichung (7.12) noch sichtbar geringer als mit der Definition nach Gleichung (7.11), so ist bei  $Sc = 25$  kaum noch ein Unterschied zu erkennen. Die Vernachlässigung der molekularen Diffusion von skalarer Varianz in der Definition der Mischfrequenz ist also auch bei den hier untersuchten, turbulenten Kanalströmungen gerechtfertigt. Gerade bei steigender  $Sc$  sinkt durch die verringerte Diffusivität der Einfluss des molekularen Diffusion noch weiter. Das LMSE Modell ist also auch zusammen mit der Definition der Mischfrequenz nach Gleichung (7.12) geeignet, die konditionierte, fluktuierende Diffusion des Skalars entlang von Lagrange Bahnen sehr gut vorher zu sagen. Die Modellierungsarbeit verlagert sich damit auf die Vorhersage der skalaren Varianz  $\overline{\Phi'^2}$  und der skalaren Dissipationsrate  $\epsilon_\Phi$ , die zur Bestimmung der Mischfrequenz benötigt werden.

### Analyse des LMSE Ansatzes für die Modellierung der konditionierten, totalen Dissipation

Eine direkte a priori Analyse des LMSE Ansatzes in der Formulierung nach Colucci et al. [8] ist aufgrund der Aufspaltung des diffusiven Terms nach Gleichung (7.20) bzw. Gleichung (6.8) nicht möglich. Zwar wirkt das LMSE Modell nach wie vor auf die skalare Zusammensetzung eines stochastischen Partikels, allerdings ist die, durch die Partikel beschriebene FDF aufgrund der räumlichen Diffusion der FDF nicht mehr am selben Ort wie die Lagrange Bahn in der DNS. In anderen Worten bedeutet dies, dass eine aus der DNS extrahierte Lagrange Bahn nicht direkt mit der Bahn eines stochastischen Partikel gleichgesetzt werden kann, da in der Transportgleichung für die stochastischen Partikel, Gleichung (7.24), ein stochastischer Term die Position zufällig im Raum versetzt. Daher wird im folgenden Abschnitt eine indirekte Analyse des LMSE Ansatzes durchgeführt. Es wird gezeigt, dass bei Verwendung des LMSE Modells im Limit von hohen  $Sc$  die durch die unterschiedliche Aufspaltung des diffusiven Terms entstandenen Ansätze ineinander übergehen. Setzt man das LMSE Modell in Gleichung (7.20) und Gleichung (7.21) ein und bringt die gefilterte Diffusion in Gleichung (7.21) auf die linke Seite, so erhält man:

$$-\frac{\partial}{\partial \Psi} \left[ \overline{\Gamma \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2} | \Psi} P_L \right] = \Gamma \frac{\partial^2 P_L}{\partial x_i^2} + \frac{\partial}{\partial \Psi} [\Omega_{M1} (\Psi^+ - \bar{\Phi}) P_L] \quad (7.34)$$

und

$$-\frac{\partial}{\partial \Psi} \left[ \overline{\Gamma \frac{\partial^2 \Phi'}{\partial x_i^2} | \Psi} P_L \right] = \frac{\partial}{\partial \Psi} [\Omega_{M2} (\Psi^+ - \bar{\Phi}) P_L], \quad (7.35)$$

wobei die Mischfrequenz  $\Omega_{M1}$  der Definition (7.19), und die Mischfrequenz  $\Omega_{M2}$  der Definition (7.12) folgt. Im folgenden wird nun untersucht wie sich die Mischfrequenzen  $\Omega_{M1}$  und  $\Omega_{M2}$  sowie die linken Seiten obiger Gleichungen im Limit hoher  $Sc$  verhalten. In dieser Analyse



werden Wandeffekte wiederum nicht berücksichtigt und nur Stichproben betrachtet welche sich in Inneren des Kanals ( $0.2 < z/h < 1.8$ ) befinden.

### Verhalten von totaler und subfilter Dissipation im Limit hoher $Sc$

Wie im vorangegangenen Abschnitt gezeigt wurde kann die molekulare Diffusion der skalaren Varianz in der Definition der Mischfrequenz  $\Omega_{M2}$  vernachlässigt werden und somit unterscheiden sich die beiden Mischfrequenzen nur in der Verwendung der totalen Dissipation gegenüber der subfilter Dissipation. Die totale Dissipation kann aufgespalten werden in

$$\Gamma \frac{\overline{\partial \Phi_\alpha}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial \Phi_\alpha}}{\partial x_i} = \Gamma \frac{\overline{\partial \Phi_\alpha}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial \Phi_\alpha}}{\partial x_i} + 2\Gamma \frac{\overline{\partial \Phi_\alpha}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial \Phi'_\alpha}}{\partial x_i} + \Gamma \frac{\overline{\partial \Phi'_\alpha}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial \Phi'_\alpha}}{\partial x_i}. \quad (7.36)$$

Setzt man diese Aufspaltung in die Definition für die Mischfrequenz (7.19) ein,

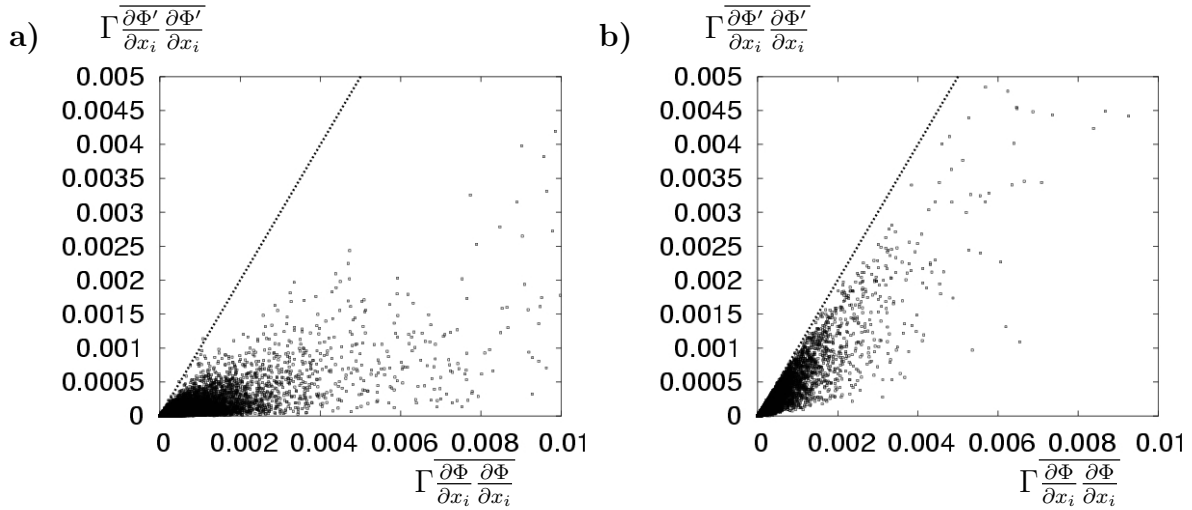
$$\Omega_M = \left( \Gamma \frac{\overline{\partial \Phi_\alpha}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial \Phi_\alpha}}{\partial x_i} + 2\Gamma \frac{\overline{\partial \Phi_\alpha}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial \Phi'_\alpha}}{\partial x_i} + \Gamma \frac{\overline{\partial \Phi'_\alpha}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial \Phi'_\alpha}}{\partial x_i} \right) \frac{1}{2\overline{\Phi_\alpha'^2}}, \quad (7.37)$$

so wird klar, dass bei dominierender Dissipation des fluktuierenden Skalars gegenüber der Dissipation durch den gefilterten Skalar Gleichung (7.37) in Gleichung (7.12) übergeht. Dies ist gerade bei hohen  $Sc$  zu erwarten, da dann die Dissipation der skalaren Varianz hauptsächlich durch das fluktuierende Skalarfeld bestimmt ist. Um dies zu verdeutlichen ist in Abbildung 7.13 der Scatterplot der fluktuierenden Dissipation über der totalen Dissipation für  $Sc = 10$  (a) und  $Sc = 49$  (b) dargestellt.

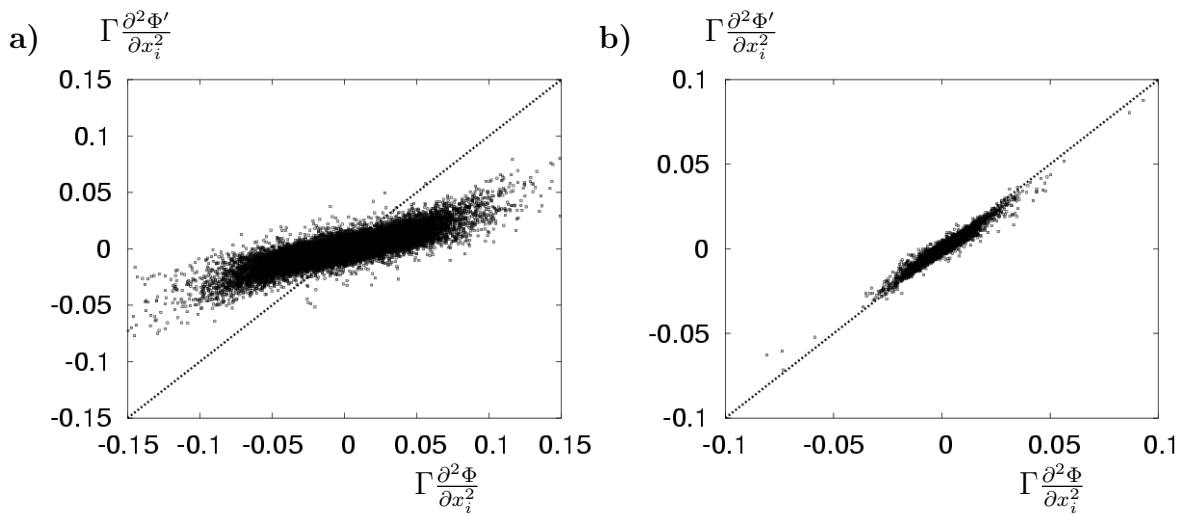
Da die Dissipation des fluktuierenden Skalarfeldes die Gesamtdissipation nicht überschreiten kann liegen keine Datenpunkte oberhalb der Winkelhalbierenden. Es ist deutlich zu erkennen, dass mit steigender  $Sc$  ein größerer Anteil der Gesamtdissipation durch die fluktuierende Dissipation  $\epsilon_{\Phi'}$  gebildet wird. Im Limit für sehr hohe  $Sc \approx 1000$  kann deshalb die gesamte Dissipation  $\Gamma \frac{\overline{\partial \Phi}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial \Phi}}{\partial x_i}$  in der Definition der Mischfrequenz (7.19) durch die fluktuierende Dissipation  $\Gamma \frac{\overline{\partial \Phi'}}{\partial x_i} \frac{\overline{\partial \Phi'}}{\partial x_i}$  ersetzt werden. Somit gehen die beiden LMSE Terme in den Gleichungen (7.34) und (7.35) bei hohen  $Sc$  ineinander über.

### Verhalten von totaler und subfilter Diffusion im Limit hoher $Sc$

Die linken Seiten der Gleichungen unterscheiden sich darin, dass in Gleichung (7.34) die totale molekulare Diffusion und in Gleichung (7.35) die fluktuierende molekulare Diffusion zu modellieren sind.



**Abbildung 7.13:** Scatterplot der fluktuierenden Dissipation über der totalen Dissipation bei  $Sc = 10$  (a) und  $Sc = 49$  (b). Stichproben entlang Lagrange Bahnen.



**Abbildung 7.14:** Scatterplot der fluktuierenden Diffusion über der totalen Diffusion bei  $Sc = 3$  (a) und  $Sc = 49$  (b). Stichproben entlang Lagrange Bahnen.

Der Scatterplot der fluktuierenden Diffusion über der totalen Diffusion ist in Abbildung 7.14 für  $Sc = 3$  und  $Sc = 49$  dargestellt. Ist bei  $Sc = 3$  die totale Diffusion noch deutlich größer als die fluktuierende, so liegen die Datenpunkte bei  $Sc = 49$  auf der Winkelhalbierenden. Dies zeigt deutlich dass mit steigender  $Sc$  die totale Diffusion mit der fluktuierenden Diffusion zusammenfällt. Somit sind die linken Seiten der beiden verschiedenen Ansätze in der DNS-FDF Methode im Limit hoher  $Sc$  identisch. Als Konsequenz kann bei hohen  $Sc$  der Term der die räumliche Diffusion der FDF beschreibt vernachlässigt werden, und beide Ansätze gehen in einander über.

## Zusammenfassung

Eingehend auf die am Anfang dieses Kapitels formulierten Fragen können aus der a priori Analyse folgende Aussagen getroffen werden:

- Das LMSE Modell ist für das Mikromischen im Kontext eines DNS-FDF Ansatzes sehr gut geeignet da dieses Modell bei einer DNS des Strömungsfeldes sowohl das erste und zweite Moment des Skalarfeldes als auch den instantanen und lokal fluktuierenden Mikromischterm gut abbilden kann.
- Die molekulare Diffusion kann bei der Definition der Mischfrequenz, gerade im Hinblick auf hohe  $Sc$  vernachlässigt werden.
- Das LMSE Modell kann sowohl für die Formulierung (6.9) als auch für die Formulierung (6.8) benutzt werden. Dabei gehen bei hohen  $Sc$  Zahlen beide Formulierungen ineinander über, da die Dissipation des Skalarfeldes bei hohen  $Sc$  nur durch die Dissipation des fluktuierenden Skalarfeldes stattfindet sowie die totale molekulare Diffusion der fluktuierenden molekularen Diffusion entspricht. In diesem Falle ist die räumliche Diffusion der FDF, wie sie in Gleichung (6.8) auftaucht, zu vernachlässigen. Das impliziert, dass auch die Diffusion durch das gefilterte Skalarfeld in der Formulierung (6.9) vernachlässigt werden kann.

Zusammengefasst bedeutet dies, dass es für die Modellierung des Mikromischens im DNS-FDF Ansatz nun von entscheidender Bedeutung ist eine gute Modellierung für die Vorhersage der subfilter Dissipationsrate  $\epsilon_\phi$  zu finden. Dies soll im nächsten Kapitel bearbeitet werden.

## 7.2 Modellierung der Mischfrequenz

Wie in Kapitel (7.1.1) gezeigt wurde, ist der LMSE Ansatz für die Modellierung des Mikromischterms bei der DNS-FDF Methode ausreichend. Voraussetzung für eine korrekte Vorhersage der konditionierten Diffusion, sei es die totale oder fluktuierende, ist die richtige Wahl der Mischfrequenz  $\Omega_M$ . Wie das vorangegangene Kapitel zeigen konnte, kann bei der Definition der Mischfrequenz die molekulare Diffusion der skalaren Varianz vernachlässigt werden. Damit ergibt sich die Mischfrequenz zu:

$$\Omega_M = \frac{\epsilon_\Phi}{2\overline{\Phi'^2}}, \text{ mit } \epsilon_\Phi = 2\Gamma \overline{\frac{\partial\Phi'}{\partial x_i} \frac{\partial\Phi'}{\partial x_i}}. \quad (7.38)$$

Die im Nenner auftretende skalare Varianz kann direkt aus der skalaren Zusammensetzung der stochastischen Partikel gewonnen werden

$$\overline{\Phi'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\Psi - \overline{\Phi})^2 P_L(\Psi, x_i, t) d\Psi, \quad (7.39)$$

und liegt damit in geschlossener Form vor. Als unbekannt, zu modellierende Größe bleibt die skalare subfilter Dissipationsrate  $\epsilon_\Phi$ . Nach einer kurzen Übersicht und Diskussion herkömmlicher Modell für die Mischfrequenz wird im folgenden Kapitel zuerst die Transportgleichung für die Dissipationsrate im Kontext der DNS-FDF Methode hergeleitet und dann die einzelnen Terme derselben entlang von Lagrange'schen Partikelbahnen in den DNS Simulationen der turbulenten Kanalströmung untersucht. Aus dieser Analyse wird eine Modellierung zur Vorhersage von  $\epsilon_\Phi$  erarbeitet.

### Herkömmliche Modelle für die Mischfrequenz

Da für die Modellierung von chemischer Reaktion letztlich immer die kleinsten Skalen ausschlaggebend sind und diese durch das Verhältnis der skalaren Dissipationsrate zur skalaren Varianz bestimmt werden, taucht in vielen Modellen zur Vermischung die Mischfrequenz bzw. Mikromischzeit auf. In diesem kurzen Abschnitt werden drei weit verbreitete Ansätze zur Mischfrequenz (bzw. Mikromischzeit) vorgestellt und diskutiert.

Der am weitest verbreitete Ansatz für die Mischfrequenz benutzt das "mechanical to scalar time scale ratio", in dem die Mikromischzeit proportional einer turbulenten Zeitskala gesetzt wird [9, 67]:

$$\Omega_M = C_\Phi \frac{\epsilon}{2k}. \quad (7.40)$$

Die Konstante wird dabei oft zu  $C_\Phi = 2$  gesetzt, was auf der Annahme eines statistisch stationären und spektralen Gleichgewicht des turbulenten und skalaren Energiespektrums beruht [16]. Wie in Kapitel 5 gezeigt wurde, weicht diese Konstante in der untersuchten turbulenten Kanalströmung stark von diesem Wert ab und ist von der Schmidt Zahl abhängig. Gerade bei niedrigen Reynoldszahlen und inhomogenen Strömungen hat diese Konstante eine nicht triviale Abhängigkeit von  $Re$  und  $Sc$  [7, 16].

Baldyga und Bourne [2] benutzen in ihrem "Engulfment" Modell eine auf der Kolmogorov Zeit basierende Mikromischzeit:

$$\Omega_M = 0.05776 \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2}. \quad (7.41)$$

Das "Engulfment" Modell basiert auf einer Betrachtung der Vermischung von zwei Umgebungen mit variablen Volumen und geht davon aus, dass das Mikromischen durch die dissipativsten Wirbel einer turbulenten Strömung bestimmt wird.

In den LES-FDF Methoden [8, 55] wird die Mischfrequenz proportional der Diffusivität und der Filterweite gesetzt:

$$\Omega_M = C_\Omega \frac{\Gamma + \Gamma_t}{\Delta^2}, \quad (7.42)$$

wobei  $C_\Omega$  hier eine empirische Konstante darstellt die von Colucci et al. zu  $C_\Omega = 3$  gesetzt wurde.

Da in dieser Arbeit ein Mikromischmodell für die DNS-FDF Methode für inhomogene Strömungen entwickelt werden soll sind alle oben vorgestellte Ansätze nicht für die Beschreibung der Mischfrequenz geeignet. Da gerade bei inhomogenen Strömungen lokal niedrige Reynoldszahlen auftreten können, kann im Zusammenhang mit gefilterten bzw. mittleren Skalargradienten im Allgemeinen nicht mehr von einem spektralen Gleichgewicht ausgegangen werden. Daher stehen die skalaren Längenmaße nicht mehr in einem bestimmten Verhältnis zu den turbulenten Längenmaßen. Vielmehr werden die Längenmaße durch zeitlich und räumlich dynamische Prozesse bestimmt. Außerdem wird in dieser Arbeit ein Modell für die Vermischung bei hohen  $Sc$  erarbeitet, die aber je nach betrachtetem Stoffsystem durchaus variieren können. Daher muss das in dieser Arbeit verwendete Modell für die Mischfrequenz zum einen eine explizite  $Sc$  Abhängigkeit besitzen und zum anderen mit den, in der DNS-FDF Methode aufgelösten Skalen des Skalars und der Turbulenz gekoppelt sein. Aus diesen Gründen scheiden die ersten beiden Formulierungen aus, da diese keine explizite  $Sc$  Abhängigkeit enthalten, keine Kopplung mit dem Skalarfeld besitzen und nur durch turbulente Größen bestimmt sind. Auch der Ansatz der LES-FDF Methode kann auf die hier entwickelte Methode nicht übertragen werden. Zum einen wurde dieser Ansatz für niedrige  $Sc \approx 1$  verwendet, was hier nicht der Fall ist. Eine  $Sc$  Abhängigkeit ist zwar über  $\Gamma$  gegeben und eine Kopplung mit dem aufgelösten Skalen könnte, je nach Modell, über  $\Gamma_t$  eingeführt werden,

doch muss zusätzlich noch ein Längenmaß bereitgestellt werden. In den LES-FDF Methoden ist dies die Filterweite  $\Delta$ , die aber bei einer DNS der Strömung nicht existiert genauso wenig wie die turbulente Diffusivität  $\Gamma_t$ . Wegen der bereits erwähnte Aufgabe, inhomogene Strömungen beschreiben zu wollen, sind auch andere numerische Längenmaße, wie z.B. die Gitterweite nicht geeignet, da diese keine Kopplung mit den gefilterten Skalen der Strömung und des Skalars ermöglichen, sondern für die gesamte Simulation statisch wären. Der Versuch ein dynamisches, mit den aufgelösten Skalarfeldern gekoppeltes Längenmaß in der DNS-FDF Methode bereitzustellen und die Formulierung von Colucci et al. zu verwenden ist gleichbedeutend mit dem Versuch die skalare subfilter Dissipationsrate direkt zu modellieren, da mit dieser und mit der Diffusivität des Skalars ein Längenmaß erzeugt werden kann.

### 7.2.1 Transportgleichungen der skalaren Varianz und der skalaren Dissipation

Die Transportgleichungen werden für die Voraussetzung hergeleitet, dass das Strömungsfeld bis zum Kolmogorov Längenmaß aufgelöst wird (DNS der Strömung) und die Filteroperation zwischen aufgelösten Strukturen größer als das Kolmogorov-Längenmaß  $\bar{\Phi}$  und nicht aufgelösten Strukturen zwischen dem Kolmogorov- und Batchelor-Längenmaß  $\Phi'$  trennt (siehe auch Kapitel 7.1.2 und 4.4):

$$u_i = \bar{u}_i, \quad \Phi = \bar{\Phi} + \Phi'. \quad (7.43)$$

#### Transportgleichung der skalaren Varianz

Mit der Aufspaltung der Variablen in gefilterten und sub-filter Anteil lässt sich eine Transportgleichung für die skalare subfilter Fluktuation schreiben zu:

$$\frac{\partial \Phi'}{\partial t} + u_j \frac{\partial \Phi'}{\partial x_j} = \Gamma \frac{\partial^2 \Phi'}{\partial x_j^2} - u_j \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial \Phi'}{\partial x_j}. \quad (7.44)$$

Multipliziert man diese nun mit der skalaren subfilter Fluktuation  $\Phi'$  und filtert anschließend, erhält man die Transportgleichung der skalaren Varianz:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\Phi'^2}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \overline{\Phi'^2}}{\partial x_j} &= \Gamma \frac{\partial^2 \overline{\Phi'^2}}{\partial x_j^2} - 2\Gamma \frac{\partial \overline{\Phi'} \partial \Phi'}{\partial x_j \partial x_j} \\ &+ u_j \frac{\partial \overline{\Phi'^2}}{\partial x_j} - u_j \frac{\partial \overline{\Phi'^2}}{\partial x_j} - 2\overline{\Phi' u_j} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_j} + 2\overline{\Phi' u_j} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_j} + 2\overline{\Phi' u_j} \frac{\partial \Phi'}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (7.45)$$

### Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate

Die Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate lässt sich aus Gleichung (7.44) herleiten. Leitet man diese Gleichung nach  $x_k$  ab und definiert den Skalargradienten zu:

$$g_k = \frac{\partial \Phi}{\partial x_k}, \quad (7.46)$$

dann erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g'_k}{\partial t} + u_j \frac{\partial g'_k}{\partial x_j} &= \Gamma \frac{\partial^2 g'_k}{\partial x_j^2} \\ &+ \left( \overline{u_j \frac{\partial \bar{g}_k}{\partial x_j}} - \overline{u_j} \frac{\partial \bar{g}_k}{\partial x_j} \right) + \left( \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} \bar{g}_j} - \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k} \bar{g}_j \right) + \left( \overline{u_j \frac{\partial g'_k}{\partial x_j}} + \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} g'_j} \right) \\ &- \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k} g'_j. \end{aligned} \quad (7.47)$$

Diese Gleichung muss mit  $g'_k$  multipliziert werden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial g'_k g'_k}{\partial t} + \frac{1}{2} u_j \frac{\partial g'_k g'_k}{\partial x_j} &= g'_k \Gamma \frac{\partial^2 g'_k}{\partial x_j^2} \\ &+ \left( \overline{u_j \frac{\partial \bar{g}_k}{\partial x_j}} - \overline{u_j} \frac{\partial \bar{g}_k}{\partial x_j} \right) g'_k + \left( \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} \bar{g}_j} - \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k} \bar{g}_j \right) g'_k + \left( \overline{u_j \frac{\partial g'_k}{\partial x_j}} + \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} g'_j} \right) g'_k \\ &- \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k} g'_j g'_k. \end{aligned} \quad (7.48)$$

Der erste Term auf der rechten Seite kann umgeformt werden zu:

$$g'_k \Gamma \frac{\partial^2 g'_k}{\partial x_j^2} = \frac{1}{2} \Gamma \frac{\partial^2 g'_k g'_k}{\partial x_j^2} - \Gamma \frac{\partial g'_k}{\partial x_j} \frac{\partial g'_k}{\partial x_j}. \quad (7.49)$$

Der erste und der fünfte Term sowie der dritte und der sechste Term in der zweiten Zeile von Gleichung (7.48) können zusammengefasst werden:

$$\begin{aligned} \overline{u_j \frac{\partial \bar{g}_k}{\partial x_j}} + \overline{u_j \frac{\partial g'_k}{\partial x_j}} &= \overline{u_j \frac{\partial g_k}{\partial x_j}} \\ \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} \bar{g}_j} + \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} g'_j} &= \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} g_j}. \end{aligned} \quad (7.50)$$

Damit ergibt sich für Gleichung (7.48):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial g'_k g'_k}{\partial t} + \frac{1}{2} u_j \frac{\partial g'_k g'_k}{\partial x_j} &= \frac{1}{2} \Gamma \frac{\partial^2 g'_k g'_k}{\partial x_j^2} - \Gamma \frac{\partial g'_k}{\partial x_j} \frac{\partial g'_k}{\partial x_j} \\ &+ \left( \overline{u_j \frac{\partial g_k}{\partial x_j}} - \overline{u_j \frac{\partial \bar{g}_k}{\partial x_j}} \right) g'_k + \left( \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} g_j} - \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} \bar{g}_j} \right) g'_k \\ &- \frac{\partial u_j}{\partial x_k} g'_j g'_k. \end{aligned} \quad (7.51)$$

Die vier Terme in der zweiten Zeile von Gleichung (7.51) können zusammengefasst werden indem die Ableitung nach  $x_k$  aus den ersten beiden Termen dieser Zeile nach außen gezogen werden:

$$\overline{u_j \frac{\partial g_k}{\partial x_j}} - \overline{u_j \frac{\partial \bar{g}_k}{\partial x_j}} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{u_j \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}} - \overline{u_j \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x_j}} \right) - \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} g_j} + \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} \bar{g}_j}. \quad (7.52)$$

Setzt man dies für die ersten beiden Terme der zweiten Zeile von Gleichung (7.51) ein, so heben sich die restlichen beiden Terme dieser Zeile mit den aus der Umformung entstandenen auf. Zieht man aufgrund der Inkompressibilitätsbedingung die Ableitung nach  $x_j$  noch vor und multipliziert die Gleichung mit zwei, ergibt sich damit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g'_k g'_k}{\partial t} + u_j \frac{\partial g'_k g'_k}{\partial x_j} &= \Gamma \frac{\partial^2 g'_k g'_k}{\partial x_j^2} - 2\Gamma \frac{\partial g'_k}{\partial x_j} \frac{\partial g'_k}{\partial x_j} + \\ 2g'_k \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_j} (\overline{u_j \Phi} - \overline{u_j \bar{\Phi}}) &- 2 \frac{\partial u_j}{\partial x_k} g'_j g'_k. \end{aligned} \quad (7.53)$$

Um die Transportgleichung für die gefilterte, skalare Dissipationsrate zu erhalten muss obige Gleichung gefiltert werden. Durch den nichtlinearen, konvektiven Term entstehen zwei zusätzlichen Terme auf der rechten Seite:



$$\begin{aligned}
\frac{\partial \overline{g'_k g'_k}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \overline{g'_k g'_k}}{\partial x_j} &= \Gamma \frac{\partial^2 \overline{g'_k g'_k}}{\partial x_j^2} - 2\Gamma \frac{\partial \overline{g'_k}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{g'_k}}{\partial x_j} + \\
&- \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j g'_k g'_k} - u_j \overline{g'_k g'_k}) \\
+ 2g'_k \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_j} (\overline{u_j \Phi} - u_j \overline{\Phi}) &- 2 \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \overline{g'_j g'_k}.
\end{aligned} \tag{7.54}$$

Diese Gleichung muss nur noch mit dem konstanten Faktor  $2\Gamma$  multipliziert werden, um die Transportgleichung der gefilterten skalaren Dissipationsrate zu erhalten:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \epsilon_\Phi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \epsilon_\Phi}{\partial x_j} &= \Gamma \frac{\partial^2 \epsilon_\Phi}{\partial x_j^2} - 4\Gamma^2 \frac{\partial \overline{g'_k}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{g'_k}}{\partial x_j} + \\
- 2\Gamma \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j g'_k g'_k} - u_j \overline{g'_k g'_k}) & \\
+ 4\Gamma g'_k \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_j} (\overline{u_j \Phi} - u_j \overline{\Phi}) &- 4\Gamma \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \overline{g'_j g'_k}.
\end{aligned} \tag{7.55}$$

Die linke Seite stellt die substantielle Veränderung der Dissipationsrate dar, entspricht also der totalen Veränderung entlang einer Lagrange'schen Bahn. Der erste Term auf der rechten Seite ist die molekulare Diffusion von  $\epsilon_\Phi$  im Raum

$$M_\epsilon = \Gamma \frac{\partial^2 \epsilon_\Phi}{\partial x_j^2}, \tag{7.56}$$

der zweite Term entspricht dem Abbau der Dissipationsrate, im weiteren Verlauf Destruktion genannt:

$$D_\epsilon = 4\Gamma^2 \frac{\partial \overline{g'_k}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{g'_k}}{\partial x_j}. \tag{7.57}$$

Der dritte Term entsteht aus der Nichtlinearität des konvektiven Terms:

$$K_\epsilon = -2\Gamma \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j g'_k g'_k} - u_j \overline{g'_k g'_k}). \tag{7.58}$$

Der vorletzte Term auf der rechten Seite ist das Skalarprodukt aus dem fluktuierenden Skalargradienten  $g'_k$  und dem Gradienten des turbulenten Gradientenstroms  $\overline{u_j g_j} - u_j \overline{g_j}$ :

$$G_\epsilon = 4\Gamma g'_k \overline{\frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_j} (u_j \Phi - u_j \overline{\Phi})}. \quad (7.59)$$

Der letzte Term auf der rechten Seite entspricht von der Struktur dem "vortex-stretching term" aus dem RANS Kontext<sup>4</sup> und wird auch als Produktionsterm angesehen:

$$V_\epsilon = -4\Gamma \overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_k} g'_j g'_k}. \quad (7.60)$$

Im folgenden Abschnitt werden die einzelnen Terme der Transportgleichung der skalaren subfilter Dissipationsrate aus der DNS der turbulenten Kanalströmung ausgewertet und analysiert.

## 7.2.2 A priori Analyse der Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate

Auch für diese Analyse wird die in Kapitel (5) beschriebene turbulente Kanalströmung bei  $Re_\tau = 180$  mit den in den Kapiteln (7.1.2) und (4.4) beschriebenen Lagrange'schen Partikelbahnen verwendet. Entlang einer Lagrange'schen Bahn im Strömungsfeld gilt:

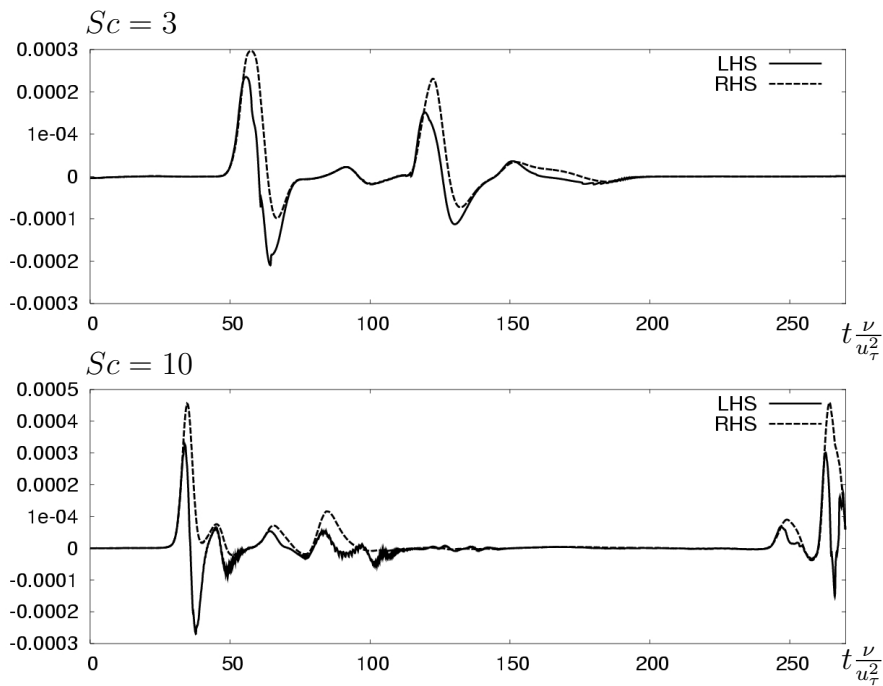
$$\frac{D\epsilon_\phi}{Dt} = M_\epsilon - D_\epsilon + K_\epsilon + G_\epsilon + V_\epsilon. \quad (7.61)$$

Die einzelnen Terme der rechten Seite wurden mit einem expliziten Verfahren vierter Ordnung berechnet und ebenso wie die Dissipation selbst auf die Partikelpositionen interpoliert. Die Zeitableitung der Dissipation entlang einer Lagrange'schen Bahn wurde in einem Postprocessing Schritt mit einem expliziten zentralen Verfahren vierter Ordnung bestimmt.

### Qualität der Auswertung

Um die Qualität der Simulationen und Auswertung zu überprüfen, wurde zuerst die linke und die rechte Seite von Gleichung (7.61) entlang der Bahnen betrachtet.

<sup>4</sup>Der vortex-stretching Term lautet im RANS Kontext  $-4\Gamma \left\langle g'_j \frac{\partial u_j}{\partial x_k} g'_k \right\rangle$



**Abbildung 7.15:** Zeitlicher Verlauf der linken (LHS) und rechten Seite (RHS) von Gleichung (7.61) entlang einer ausgewählten Lagrange Bahn bei  $Sc = 3$  und  $Sc = 10$ .

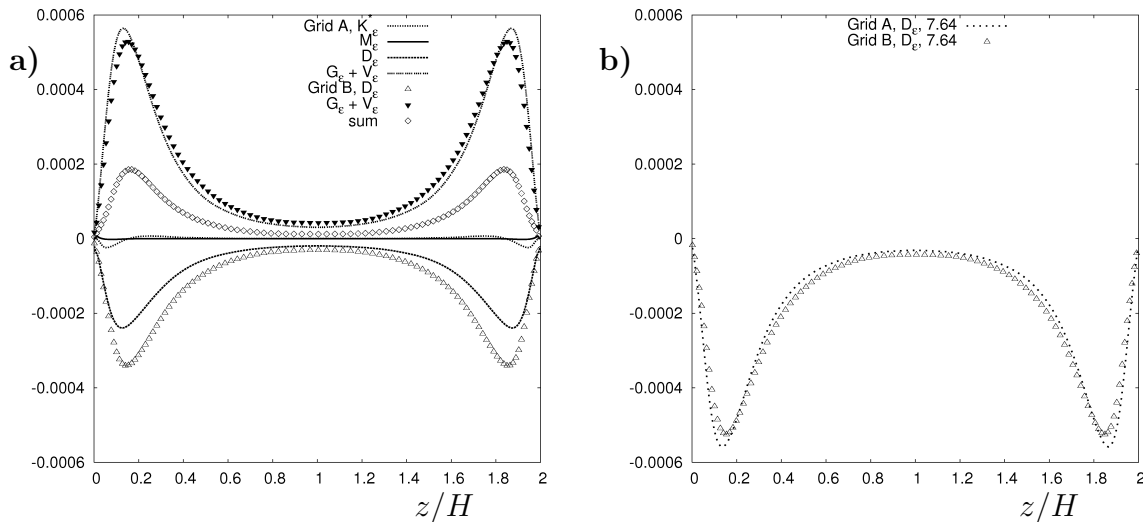
Über weite Strecken zeigt die Bilanzierung der skalaren Dissipationsrate in Abbildung 7.15 bei beiden  $Sc$  einen Verlauf mit nur geringem Fehler. Es sind allerdings einzelne Ereignisse sichtbar, bei denen die skalare Dissipationsrate stark ansteigt, also skalare subfilter Dissipation produziert wird und dann wieder stark abfällt, also skalare subfilter Dissipation abgebaut wird. Der Anstieg der skalaren subfilter Dissipationsrate wird durch die Bilanzierung der rechten Seite von Gleichung (7.61) richtig getroffen, der Abfall jedoch nicht. Dies deutet auf ein Auflösungsproblem bei der Auswertung der rechten Seite von Gleichung (7.61) hin. Die einzelnen Terme (7.56) mit (7.60) beschreiben Prozesse, die auf unterschiedlichen Skalen ablaufen. So beschreiben die Produktionsterme<sup>5</sup>  $G_\epsilon$  und  $V_\epsilon$  Prozesse die bei  $\eta_K$ , also bei den kleinsten Skalen im Strömungsfeld und im gesamten viskos-konvektiven Bereich (also zwischen  $\eta_K$  und  $\eta_B$ ) stattfinden. Die Destruktion  $D_\epsilon$  hingegen findet hauptsächlich bei den kleinsten Skalen im Skalarfeld, also bei  $\eta_B$  statt. Da sich diese am äußersten Rand der darstellbaren Skalen, also bei den hohen Wellenzahlen, befinden, werden sich bei diesem Term Auflösungsprobleme der verwendeten numerischen Berechnungs- und Auswerteschemata als erstes bemerkbar machen (vergleiche Kapitel 4.2). Um dies zu überprüfen, wurde eine weitere Simulation bei  $Sc = 3$  auf Gitter **C** durchgeführt, also bei einer Auflösung die für  $Sc = 10$  ausreichen würde. Diese Gitterstudie wurde in einem Euler Rahmen ausgewertet. Dafür wurde die Transportgleichung für die skalare subfilter Dissipationsrate für den Euler

<sup>5</sup>Es wird im weiteren Kapitel gezeigt, dass  $G_\epsilon$  einen Produktionsterm darstellt

Rahmen umgestellt:

$$\frac{\partial \epsilon_\Phi}{\partial t} = M_\epsilon - D_\epsilon - 2\Gamma \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u_j g'_k g'_k} + G_\epsilon + V_\epsilon. \quad (7.62)$$

Bis auf den konvektiven Term entsprechen alle Terme auf der rechten Seite von Gleichung (7.62) den Termen (7.56), (7.57), (7.59) und (7.60). Eine Ausnahme stellt der konvektive Term  $K_\epsilon$  (7.58) dar. Da dieser in der Form (7.58) nur in der Lagrange'schen Formulierung auftritt wurde für die hier durchgeführte statistische Auswertung im Euler Rahmen der Term  $K_\epsilon^* = -2\Gamma \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u_j g'_k g'_k}$  an seiner statt ausgewertet. Da die Strömung statistisch stationär ist, erwartet man dass sich alle Terme der rechten Seite von Gleichung (7.62) zu Null addieren.



**Abbildung 7.16:** (a): Bilanzierung der rechten Seite von Gleichung (7.62) bei  $Sc = 3$  auf Gitter **A** (Linien) und Gitter **B** (Symbole); (b): Berechnung der Destruktion nach Gleichung (7.63) auf Gitter **A** (Linie) und Gitter **B** (Symbol)

Aus Abbildung (7.16) lassen sich mehrere Aussagen ableiten. Es zeigt sich, dass die molekulare Diffusion  $M_\epsilon$  sowie die Konvektion  $K_\epsilon^*$  sich im statistischen Mittel in der Kanalmitte zu Null summieren. Nur nahe der Wand weicht der konvektive Term etwas von Null ab. Außerdem ist im statistischen Mittel die Summe der Terme  $G_\epsilon$  und  $V_\epsilon$  positiv und kann deshalb als Produktionsterm angesehen werden. Die Bilanzierung aller Terme summiert sich noch nicht zu Null und dementsprechend ist noch ein numerischer Fehler vorhanden. Betrachtet man speziell die Produktions- und Destruktionsterme, erkennt man, dass bei einer Erhöhung der Auflösung sich die Produktionsterme nur gering verändern, der Destruktionsterm hingegen wächst. Dies lässt sich dadurch erklären, dass sich die Destruktion der skalaren Dissipationsrate auf kleineren Skalen ereignet als die Produktion, somit schlechter aufgelöst ist und daher unterschätzt wird. Der gesamte numerische Fehler in der Auswertung der

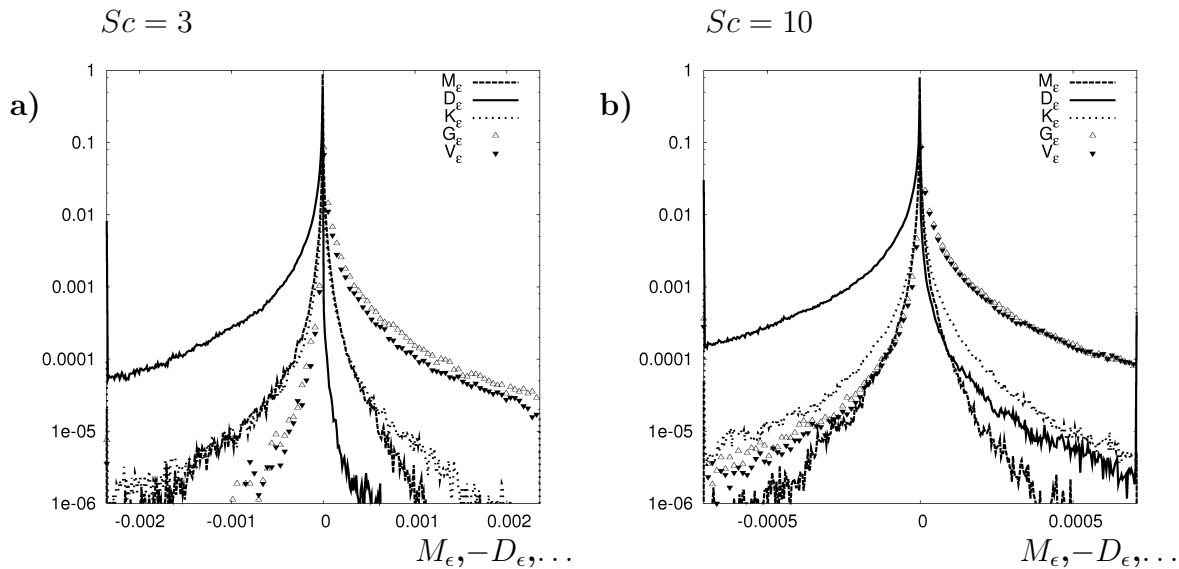
Transportgleichung für die skalare subfilter Dissipationsrate kann somit dem Destruktionsterm zugeschlagen werden. Für die Auswertung wurde daher der Destruktionsterm aus der Differenz der totalen Veränderung der subfilter Dissipationsrate und den übrigen Termen der rechten Seite berechnet [28]:

$$D_\epsilon = -\frac{D\epsilon_\Phi}{Dt} + M_\epsilon + K_\epsilon + G_\epsilon + V_\epsilon. \quad (7.63)$$

Die nach dieser Gleichung bestimmte Destruktion ist in Abbildung 7.16b für die Gitter **A** und **B** dargestellt. Beide Kurven zeigen nur geringe Abweichungen voneinander, d.h. die Methode zur Berechnung der Destruktion zeigt nur geringe Unterschiede bei einer Verfeinerung des Gitters und kann deshalb als geeignet für die Auswertung der Destruktion auf den Gittern **A** mit **C** für  $Sc = 3$  bis  $Sc = 49$  angesehen werden. Im weiteren Verlauf wird daher die Destruktion  $D_\epsilon$  in der Transportgleichung für die skalare subfilter Dissipationsrate aus der Bilanz nach Gleichung (7.63) bestimmt<sup>6</sup>.

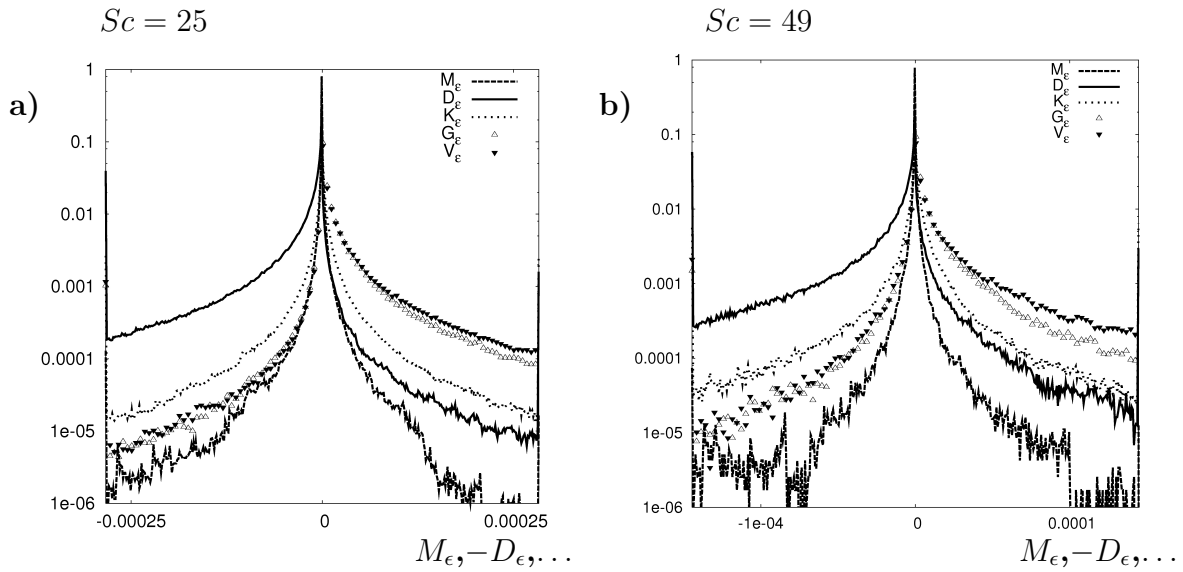
### Analyse der Transportgleichung

Für die Analyse der Transportgleichung der subfilter Dissipationsrate wurden die PDF der einzelnen Terme mit den lokalen und instantanen Werten entlang aller Lagrange Bahnen im Inneren des Kanals ( $0.2 < z/h < 1.8$ ) gebildet.



**Abbildung 7.17:** PDF der einzelnen Terme der rechten Seite von Gleichung 7.61 bei  $Sc = 3$  (a) und  $Sc = 10$  (b).

<sup>6</sup>Für den Lagrange Kontext; im Euler Kontext wird der konvektive Term mit  $K_\epsilon^*$  und die substantielle Ableitung mit  $\frac{\partial \epsilon_\Phi}{\partial t}$  ersetzt



**Abbildung 7.18:** PDF der einzelnen Terme der rechten Seite von Gleichung 7.61 bei  $Sc = 25$  (a) und  $Sc = 49$  (b).

Abbildungen 7.17 und 7.18 zeigen, dass sowohl die molekulare Diffusion  $M_\epsilon$  als auch der konvektive Term  $K_\epsilon$  in Gleichung (7.61) in der instantanen und lokalen Betrachtung für alle  $Sc$  vernachlässigbar sind. Die PDF dieser beiden Terme hat eine deutlich geringere Varianz als die der anderen, die Breite ist sehr viel kleiner und der Mittelwert ist  $\approx 0$  (vgl. Abbildung 7.16). Der Transport der skalaren Dissipationsrate wird durch die Bilanzierung der Destruktion skalarer Dissipation  $-D_\epsilon$  und den Termen  $G_\epsilon$  und  $V_\epsilon$  bestimmt. Die PDFs zeigen eindeutig, dass  $G_\epsilon$  und  $V_\epsilon$  Produktionsterme darstellen. Ist bei  $Sc = 3$  der Einfluss von  $G_\epsilon$  noch größer als der von  $V_\epsilon$ , so kehrt sich dies mit steigender  $Sc$  um. Der positive Zweig der PDF der Destruktionsterme rührt durch numerische Fehler in der Berechnung nach Gleichung 7.63.

### 7.2.3 Modellierung der Transportgleichung der subfilter Dissipationsrate

Ziel dieses Abschnittes ist es nun, die Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate zu modellieren um damit für die stochastischen Partikel der Monte-Carlo Methode die instantane und lokale skalare Dissipationsrate vorher zusagen. In der DNS-FDF Methode stehen dafür sämtliche Informationen über die turbulente Strömung zur Verfügung sowie die aufgelösten skalaren Größen. Wie die Untersuchung im vorherigen Kapitel gezeigt hat kann die Transportgleichung der skalaren subfilter Dissipationsrate vereinfacht werden. Da die Transportgleichung entlang der Bahnen der stochastischen Partikel gelten soll, ist es daher das Ziel folgende, vereinfachte Lagrange Transportgleichung

$$\frac{D\epsilon_\phi}{Dt} = G_\epsilon + V_\epsilon - D_\epsilon \quad (7.64)$$

zu modellieren. Um die Schwierigkeit der Modellierungsaufgabe beherrschbar zu halten werden in diesem Modellierungsschritt Wandeinflüsse ausgeklammert. Die Modellierung für Bereiche nahe der Wand müssten die Art der Randbedingung mit einbeziehen. Außerdem wurde in Kapitel (5) gezeigt, dass nahe der Wand alle Terme in der Transportgleichung der skalaren Varianz wichtig sind, was darauf schließen lässt, dass auch in der Transportgleichung der skalaren Dissipationsrate komplexe Zusammenhänge herrschen. Da auch in der a priori Analyse der Transportgleichung im vorherigen Kapitel nur der innere Bereich der Kanalströmung ( $0.2 < z/h < 1.8$ ) betrachtet wurde, können die getroffenen Vereinfachungen nur in diesem Bereich gelten. Um für die vorgeschlagenen Modelle die Modellkonstanten zu bestimmen, werden die Daten aus der DNS für den zu modellierenden Term und für das Modell zu jedem Zeitpunkt entlang der Lagrange'schen Bahnen ausgewertet. Die so erhaltenen Stichproben werden einer, auf die wandnormale Koordinate  $z$  konditionierten, Ensemble Mittelung<sup>7</sup> unterzogen. Der Modellparameter kann dann durch den Vergleich der beiden Kurven in der Kanalmitte bestimmt werden. Die Kanalmitte wurde deshalb gewählt, da dort die Bedingungen am ehesten isotrop sind. Durch die Abstimmung dieser Ensemble gemittelten Daten werden zum einen alle Lagrange Bahnen mit einbezogen und zum anderen wird die Mindestanforderung an das Modell, das statistische Mittel vorherzusagen, dadurch erreicht.

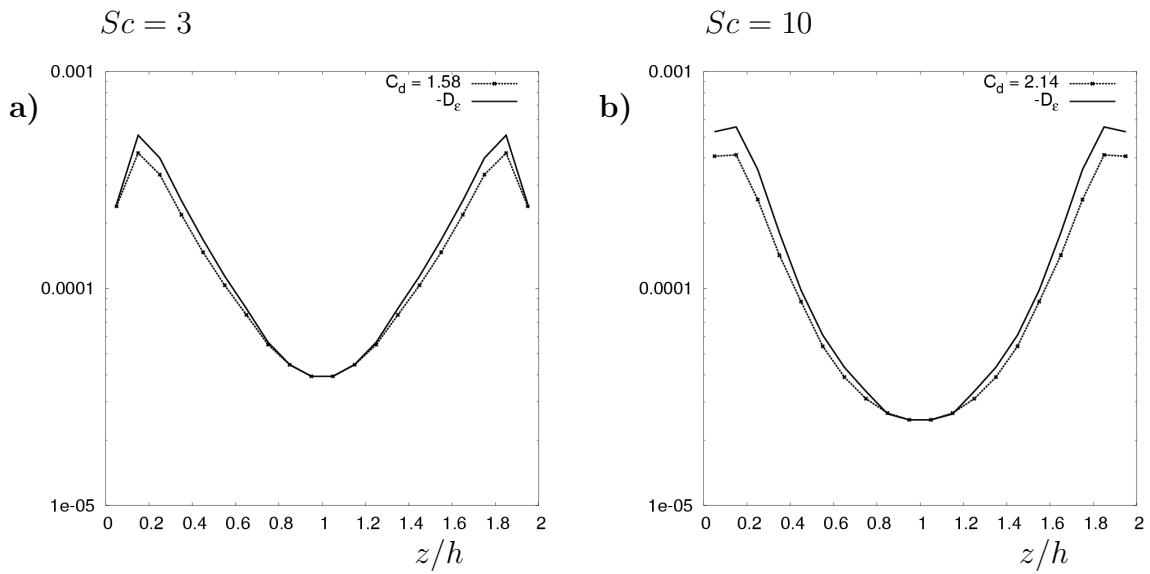
### Modellierung von $D_\epsilon$

Sowohl in der RANS (Gleichung 3.17) wie auch im SR-Modell (Gleichung 3.33) wird die Destruktion der skalaren Dissipationsrate als Produkt zwischen der subfilter Dissipationsrate selbst und einem inversen Zeitmaß modelliert. Das Zeitmaß ist das gleiche wie für den Abbau der skalaren Varianz selbst, da der Abbau von skalarer Varianz auch für die Destruktion von skalarer Dissipationsrate sorgt [13, 16]. Daher wird analog zum RANS bzw. zum SR-Modell folgende Modellierung vorgeschlagen, wobei  $\epsilon_\Phi/\overline{\Phi'^2}$  als Zeitmaß verwendet wird:

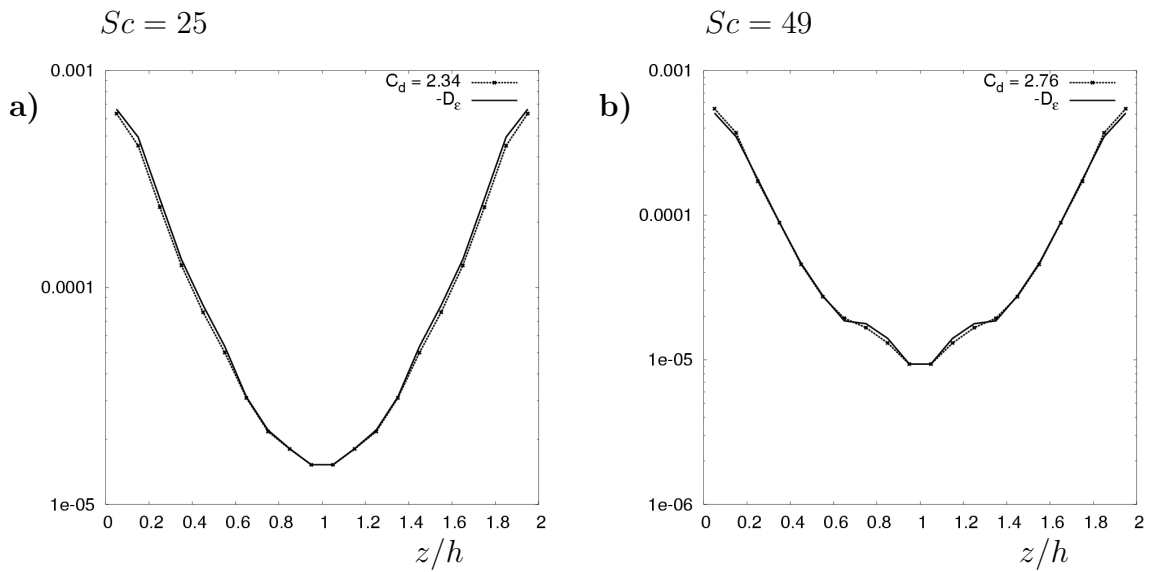
$$D_\epsilon = C_d \frac{\epsilon_\Phi}{\overline{\Phi'^2}} \epsilon_\Phi . \quad (7.65)$$

Die Abbildungen (7.19) und (7.20) zeigen die linke und rechte Seite von Gleichung (7.65), wie bereits erwähnt, auf die wandnormale Koordinate Ensemble gemittelt. Der Modellparameter  $C_d$  wurde durch eine Anpassung des Modells an den aus der DNS bestimmten Destruktionsterm in der Kanalmitte bestimmt, so dass beide Kurven dort aufeinander fallen. Wie die Abbildungen (7.19) und (7.20) zeigen, ist der Modellparameter  $C_d$  von  $Sc$  Abhängig und bewegt sich zwischen 1.58 bei  $Sc = 3$  und  $C_d = 2.76$  bei  $Sc = 49$ . Dies steht im Widerspruch zu den RANS und SR-Modellen [16] in denen  $C_d = 3$ , unabhängig von  $Sc$ , gilt. Diese Abhängigkeit hat ihre Ursache in der Korrelation der zur Modellierung benutzten Größen  $\overline{\Phi'^2}$  und  $\epsilon_\Phi$ . Im Gegensatz zu den Modellierungsansätzen aus Kapitel 3.3, welche die Ensemble

<sup>7</sup>Die Intervallbreite beträgt  $0.1h$ .



**Abbildung 7.19:** Modellierung von  $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65), linke Seite aus DNS  $\langle -D_\epsilon \rangle$  (Linie) rechte Seite Modell  $\langle C_d \epsilon_\Phi^2 / \overline{\Phi'^2} \rangle$  (Symbole)



**Abbildung 7.20:** Modellierung von  $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65), linke Seite aus DNS  $\langle -D_\epsilon \rangle$  (Linie) rechte Seite Modell  $\langle C_d \epsilon_\Phi^2 / \overline{\Phi'^2} \rangle$  (Symbole)

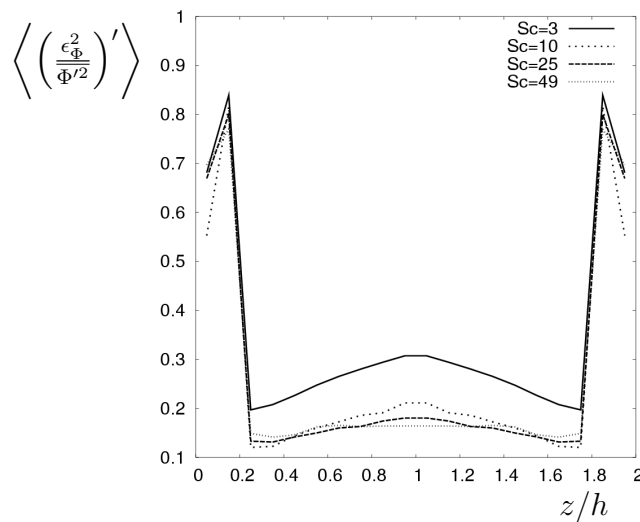
gemittelten Größen zur Modellierung verwenden, werden in der DNS-FDF Methode die lokalen und instantanen Größen  $\overline{\Phi'^2}$  und  $\epsilon_\Phi$  zur Modellierung verwendet. Gerade bei niedrigen  $Sc$  ist zu erwarten, dass die skalare subfilter Varianz mit der skalaren subfilter Dissipationsrate korreliert, gerade wenn sie am gleichen Ort zum gleichen Zeitpunkt ausgewertet werden.



Berechnet man den Anteil

$$\left\langle \left\langle \left( \frac{\epsilon_\Phi^2}{\overline{\Phi'^2}} \right)' \right\rangle \right\rangle = \left\langle \frac{\epsilon_\Phi^2}{\overline{\Phi'^2}} \right\rangle - \frac{\langle \epsilon_\Phi \rangle^2}{\langle \overline{\Phi'^2} \rangle}, \quad (7.66)$$

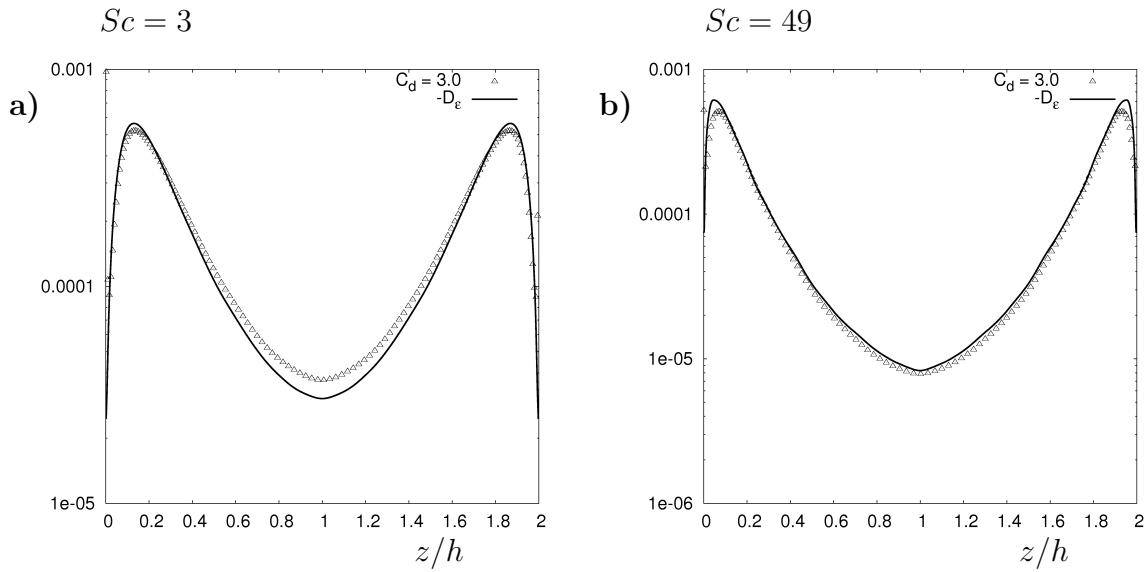
als Maß für diese Korrelation und normiert diese mit  $\left\langle \frac{\epsilon_\Phi^2}{\overline{\Phi'^2}} \right\rangle$ , so zeigt Abbildung (7.21) dass dieser "fluktuierende" Anteil (linke Seite von Gleichung 7.66) des Terms mit steigender  $Sc$  abnimmt.



**Abbildung 7.21:** Anteil der Korrelation am Gesamtterm (Gl. 7.66) in Abhängigkeit von  $Sc$

Ist in der Kanalmitte bei  $Sc = 3$  noch ca. 30% des Modellterms durch diesen "fluktuierenden" Anteil bestimmt, so sinkt dieser bei  $Sc = 49$  auf ca. 15% ab. Gleichzeitig nähert sich  $C_d$  mit steigender  $Sc$  dem von Fox [13, 16] vorgeschlagenen Wert  $C_d = 3$  an<sup>8</sup>. Bildet man den Modellterm für die Destruktion der skalaren Dissipationsrate mit den Ensemble gemittelten Werten  $\langle \overline{\Phi'^2} \rangle$  und  $\langle \epsilon_\Phi \rangle$ , die allerdings in einer DNS-FDF Simulation nicht zur Verfügung stehen würden, ergibt sich für alle  $Sc$  der Parameter  $C_d = 3$ . Dies ist in Abbildung 7.22 für  $Sc = 3$  und  $Sc = 49$  dargestellt. Es kann davon ausgegangen werden, dass mit weiterer Steigerung der Schmidt Zahl die Korrelation zwischen der lokalen skalaren Varianz und der lokalen skalaren Dissipationsrate weiter abnimmt und damit auch der "fluktuierende" Anteil des Modellterms vernachlässigbar ist. Daher wird im Limit für hohe  $Sc$  die Modellierung mit den lokalen und instantanen Größen der Modellierung mit den Ensemble gemittelten Werten entsprechen und der Modellparameter entspricht dann  $C_d = 3$ . Weitere Simulationen bei höheren  $Sc$  wären sinnvoll um diese Tendenz zu untersuchen.

<sup>8</sup>Dieser Wert wurde aus der Analyse von Daten eines nur durch Diffusion abklingenden Skalarfeldes mit isotropen Anfangsbedingungen gewonnen



**Abbildung 7.22:** Modellierung von  $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65), linke Seite aus DNS  $\langle -D_\epsilon \rangle$  (Linie) rechte Seite Modell  $C_d \langle \epsilon_\Phi \rangle^2 / \langle \overline{\Phi'^2} \rangle$  (Symbole), Ensemble gemittelte Eingangsgrößen

In jedem Fall liefert das Modell für die Destruktion der subfilter Dissipationsrate auch nahe den Wänden eine sehr gute Vorhersage und kann den Ort des Maximums der Destruktion gut wiedergeben. Unterschätzt das Modell bei  $Sc = 3$  und  $Sc = 10$  noch etwas die Destruktion, so ist bei  $Sc = 25$  und  $Sc = 49$  die Übereinstimmung (Abbildung 7.20) nahezu perfekt. Bei Verwendung der Ensemble gemittelten skalaren Varianz und Dissipationsrate und  $C_d = 3.0$  ist die Übereinstimmung bei den niedrigeren  $Sc$  etwas besser und auch in Wandnähe sehr gut, was darauf hinweisen könnte dass bei hoher  $Sc$  dieser Modellierungsansatz auch für die Wandnähe sehr gut geeignet sein könnte.

### Modellierung von $V_\epsilon$ und $G_\epsilon$

Es konnte gezeigt werden dass sowohl  $V_\epsilon$  als auch  $G_\epsilon$  Produktionsterme für die skalare subfilter Dissipationsrate darstellen. Betrachtet man die Transportgleichung der spektralen skalaren Energie (3.25) kann man aus dieser die Transportgleichung für die Dissipationsrate  $\epsilon_{\Phi D}$  (Gleichung 3.26) herleiten. Da gerade bei hohen  $Sc$  die subfilter Dissipationsrate der gesamten Dissipation entspricht  $\epsilon_\Phi \approx \epsilon_{\Phi D}$ , kann auch Gleichung (3.34) für die Modellierung der subfilter Dissipationsrate entlang von Lagrange-Bahnen herangezogen werden. Vernachlässigt man die Produktion durch den gefilterten Gradienten und nimmt an dass der Transport skalarer Energie "lokal im Wellenzahlenraum und nur in einer Richtung, von den kleinen zu den großen Wellenzahlen" [13, 14] stattfindet, so ergibt sich die Modellgleichung

$$\frac{D\epsilon_\Phi}{Dt} = C_{D1} \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2} \tau_D + C_s \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2} \epsilon_\Phi - C_d \frac{\epsilon_\Phi}{\Phi'^2} \epsilon_\Phi \quad (7.67)$$

für die subfilter Dissipationsrate. Nach Fox [16] und Veluda et al. [71] sind die Modellkonstanten in dieser Gleichung unabhängig von  $Sc$ . In dieser Gleichung gibt es zwei Produktionsmechanismen, die Produktion durch den Transfer spektraler, skalarer Energie (erster Term) sowie die Produktion durch den Wirbelstreckterm (zweiter Term). Eine genaue Zuordnung der beiden Produktionsterme in Gleichung (7.67) zu den Produktionstermen in Gleichung 7.64 ist aufgrund der Gestaltung der Terme  $G_\epsilon$  und  $V_\epsilon$  hier noch nicht möglich. Zum einen sind in  $G_\epsilon$  Effekte durch den gefilterten Skalargradienten  $\bar{g}_i$  und zum anderen auch ein Produkt zwischen den fluktuierenden Skalargradienten vorhanden. Diese letzten beiden Terme in der zweiten Zeile von Gleichung 7.48 müssten eher dem "vortex-stretching" Term  $V_\epsilon$  zugeschlagen werden, da diese beiden Terme eine Interaktion zwischen dem Geschwindigkeitsfeld und dem Produkt aus den subfilter Fluktuationen des Skalargradienten darstellen. Trotzdem muss die Summe der modellierten Produktionsterme der Summe der aus der DNS extrahierten Produktionsterme entsprechen:

$$G_\epsilon + V_\epsilon = C_{D1} \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \tau_D + C_s \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \epsilon_\Phi. \quad (7.68)$$

$\tau_D$  ist dabei der Fluss an skalarer Energie in den dissipativen Bereich hinein. Analog zum SR-Modell kann dieser Fluss mit dem Produkt aus einer Zeitkonstante mal der skalaren Varianz, welche sich nahe der Grenzwellenzahl  $k_K$  befindet, angenähert werden. Das charakteristische Zeitmaß im Bereich der Kolmogorov Länge und für den viskos-konvektiven Bereich ist die Kolmogorov Zeit  $t_K = (\nu/\epsilon)^{1/2}$ . Die skalare Varianz an der Kolmogorov Wellenzahl wird mit einem fluktuierenden Skalarfeld  $\Phi^*$  berechnet, das aus der Differenz des gefilterten mit dem zweimal gefilterten Skalarfeld bestimmt wird:

$$\tau_D = \frac{1}{t_M} \Phi^{*2} = C_{D2} \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \Phi^{*2}, \quad (7.69)$$

$$\Phi^{*2} = \left(\bar{\Phi} - \overline{\bar{\Phi}}\right)^2. \quad (7.70)$$

Der Modellparameter  $C_{D2}$  ist eine Funktion der Schmidt Zahl. Die Abhängigkeit von  $Sc$  ergibt sich daraus, dass sich die gesamte subfilter Dissipation  $\epsilon_\Phi$  bei den kleinsten im Skalarfeld auftretenden Strukturen befindet.  $\tau_D$  ist der Fluss von skalarer spektraler Energie in den dissipativen Bereich des Skalarfeldes, wurde aber mit der skalaren Varianz  $\Phi^{*2}$  bei den kleinsten Strukturen im Strömungsfeld angenähert. Um die Zeit zu berechnen, welche die skalare Varianz benötigt um bis zu den dissipativen Strukturen im Skalarfeld zu gelangen, legt man die Differentialgleichung (3.2) für die Vermischung bzw. Größe der Struktur im viskos-konvektiven Bereich zu Grunde. So ergibt sich als Mischzeit um vom kleinsten Längenmaß in der Strömung  $l_K$  bis zum kleinsten Längenmaß im Skalarfeld  $l_B$  zu gelan-

gen:

$$t_{mix} = -\ln\left(\frac{l_B}{l_K}\right) t_K . \quad (7.71)$$

Das Verhältnis  $l_B/l_K$  wird nach Batchelor (siehe Kapitel 2.4) mit  $1/\sqrt{Sc}$  angegeben, soll aber hier mit  $1/Sc^R$  angenommen werden, da die Untersuchung der turbulenten Kanalströmung die Batchelor Skalierung bei der niedrigen Reynolds Zahl nicht bestätigen konnten. Damit ergibt sich als Lösung für die Mischzeit

$$t_{mix} = \frac{1}{R} \ln(Sc) \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} . \quad (7.72)$$

Vergleicht man diese Mischzeit mit der Zeit  $t_M$  in Gleichung (7.69), so ergibt sich für den Modellparameter  $C_{D2} = C_{D3}R/\ln(Sc)$ . Die Konstanten  $C_{D1}, C_{D3}$  und  $R$  können zu einer Konstanten  $C_D$  zusammengefasst werden und somit ergibt sich für die Modellierung der beiden Produktionsterme

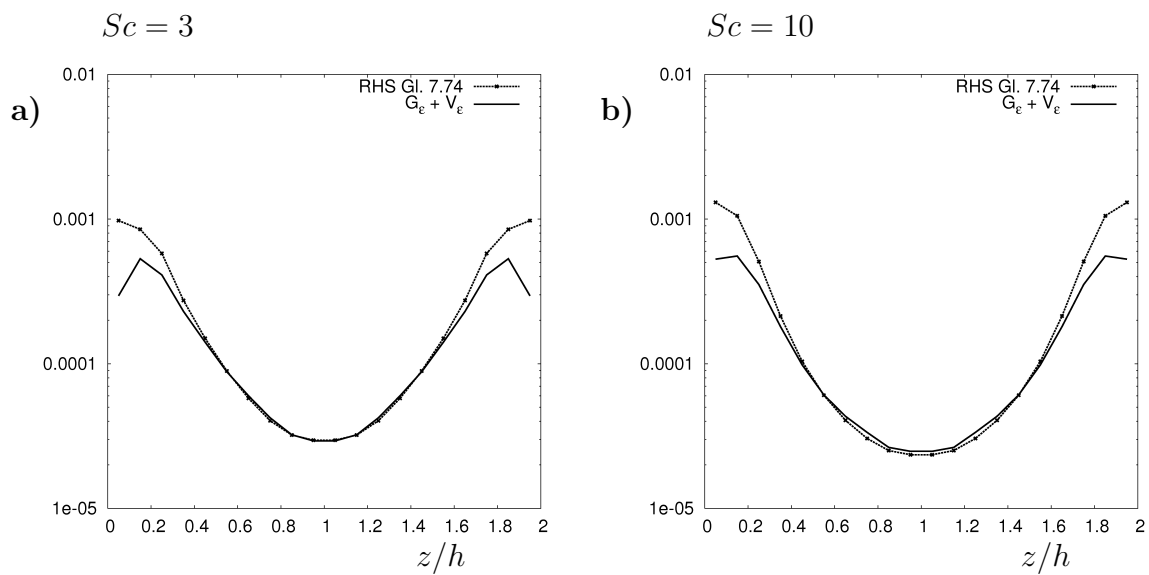
$$G_\epsilon + V_\epsilon = C_D \frac{1}{\ln Sc} \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right) \Phi^{*2} + C_s \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \epsilon_\Phi . \quad (7.73)$$

Für die Bestimmung der Modellkonstanten wurden die Produktionsterme  $G_\epsilon$  und  $V_\epsilon$  sowie die Modellterme auf der rechten Seite von Gleichung (7.73) auf den Lagrange Bahnen ausgewertet und dann konditioniert auf die  $z$ -Koordinate  $\langle |z| \rangle$  gemittelt. Mit den Mittelwerten in der Kanalmitte wurde eine Least-Square Anpassung der Modellkonstanten durch die bei den Schmidt Zahlen 3, 10, 25 und 49 aufgestellte Gleichung (7.73) durchgeführt. Die Modellkonstanten wurden bestimmt zu:

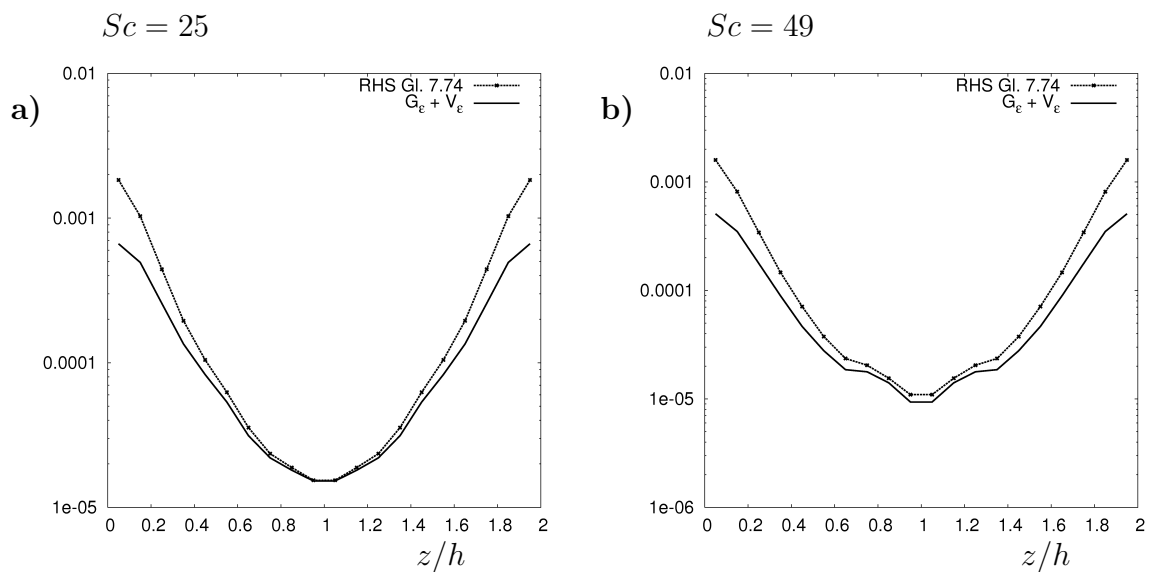
$$C_s = 0.99232 , \quad C_D = 1.11782 . \quad (7.74)$$

Die Abbildungen 7.23 und 7.24 zeigen die linke und die rechte Seite von Gleichung (7.73) bei den unterschiedlichen  $Sc$  mit den Modellparametern nach Gleichung (7.74). Im Inneren Bereich des Kanals ( $0.3 < z/h < 1.7$ ) ist die Übereinstimmung zwischen Modell und DNS Daten sehr gut. Nahe der Wand ergeben sich Diskrepanzen die mit der Vernachlässigung des gefilterten Gradienten zusammenhängen könnten.

Ein Problem dieser Herangehensweise ist, dass die Modellparameter  $C_s$  und  $C_D$  als Schmidt Zahl unabhängig angenommen wurden. Gerade die Analyse und Modellierung der Destruktion der Dissipationsrate hat gezeigt, dass durch die Korrelation der Eingangsgrößen eine  $Sc$



**Abbildung 7.23:** Modellierung von  $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73), linke Seite aus DNS (Linie) rechte Seite Modell (Symbole)



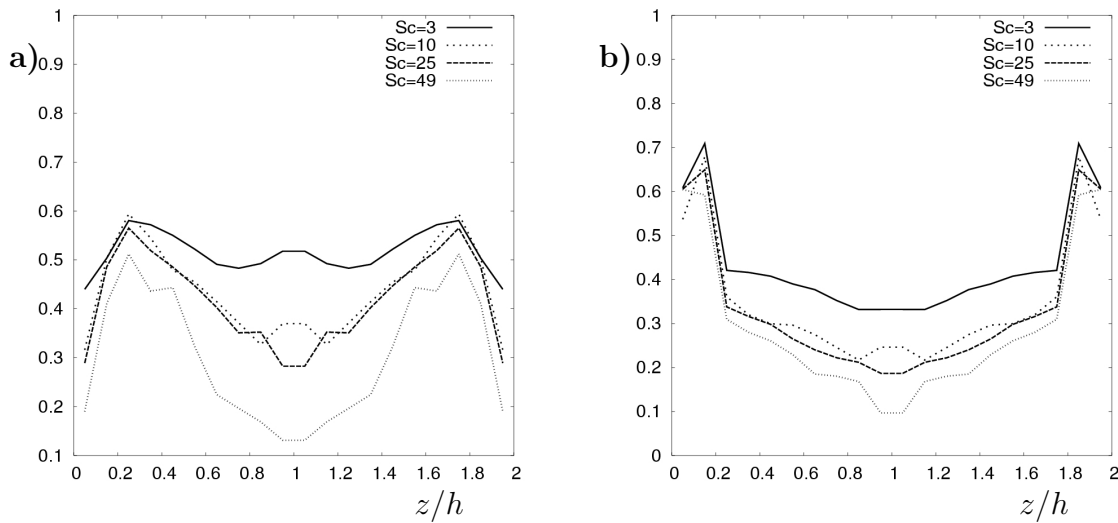
**Abbildung 7.24:** Modellierung von  $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73), linke Seite aus DNS (Linie) rechte Seite Modell (Symbole)

Abhängigkeit der Modellparameter entstehen kann. Um dies zu untersuchen wurde analog zu Gleichung (7.66) der "fluktuierende" Anteil der Modellterme bestimmt:

$$\left\langle \left( \frac{\epsilon}{\nu} \Phi^{*2} \right)' \right\rangle = \left\langle \frac{\epsilon}{\nu} \Phi^{*2} \right\rangle - \frac{\langle \epsilon \rangle}{\nu} \langle \Phi^{*2} \rangle, \quad (7.75)$$

$$\left\langle \left( \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2} \epsilon_{\Phi} \right)' \right\rangle = \left\langle \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2} \epsilon_{\Phi} \right\rangle - \left( \frac{\langle \epsilon \rangle}{\nu} \right)^{1/2} \langle \epsilon_{\Phi} \rangle. \quad (7.76)$$

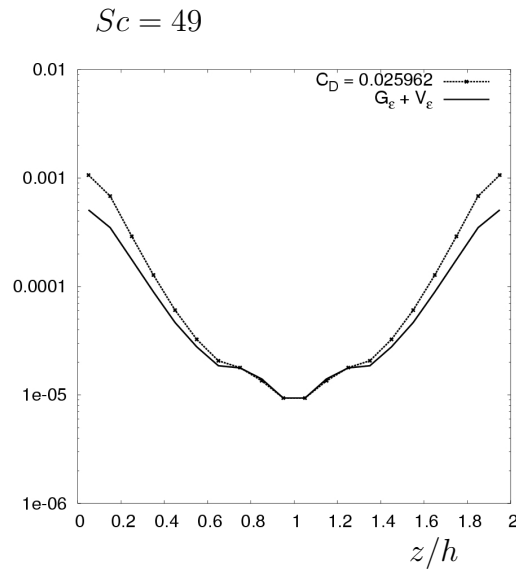
Dieser Anteil wurde mit dem Term selbst normiert und ist in Abbildung 7.25 für die verschiedenen  $Sc$  dargestellt.



**Abbildung 7.25:** Anteil der Korrelationen am Modellterm, (a) Gleichung (7.75), (b) Gleichung (7.76)

Bei  $Sc = 3$  beträgt der Anteil der Korrelationen in beiden Termen zwischen 40% und 50% und fällt in der Kanalmitte bei  $Sc = 49$  bis auf 10%–15% ab. Geht man davon aus, dass dies auch zu einer  $Sc$  Abhängigkeit der Modellparameter bei niedrigen  $Sc$  führt, ist die Miteinbeziehung aller Simulationen für die Bestimmung der Modellkonstanten nicht sinnvoll. Wie sich in der Modellierung der Destruktion zeigte, ist bei  $Sc = 49$  die Korrelation soweit abgesunken dass der Modellparameter  $C_d$  nahe an den Parameter aus der RANS heran reicht, was darauf hinweist dass der Term bei  $Sc = 49$  unabhängig von  $Sc$  ist. Legt man diese Zusammenhänge auch für die Produktionsterme zugrunde, so ist es sinnvoll die Modellparameter nur an den  $Sc = 49$  Fall anzupassen.  $C_s$  wird dabei wie in der Literatur zu den RANS Methoden mit  $C_s = 1$  angenommen und  $C_D$  bestimmt sich dadurch zu  $C_D = 0.025962$ . Dieser niedrige Wert resultiert daraus, dass mit steigender  $Sc$  fast die gesamte Produktion von skalarer Dissipationsrate aus dem Wirbelstreckterm resultiert, und liegt sehr nahe an dem von Fox und Vedula et al. [16, 71] angegebenen Wert von  $C_D = 0.02$ .

Abbildung 7.26 zeigt die Produktionsterme und deren Modellierung bei  $Sc = 49$  mit den an diesen Fall angepassten Parametern. Die Übereinstimmung in der Kanalmitte ist per



**Abbildung 7.26:** Modellierung von  $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73), linke Seite aus DNS (Linie) rechte Seite Modell (Symbole) mit den Modellkonstanten  $C_D = 0.02596$  und  $C_s = 1.0$

Definition gegeben. Zu den Wänden hin verschlechtert sich die Vorhersage durch das Modell etwas, kann aber den Verlauf und die Größenordnung durchaus noch gut wiedergeben.

### Zusammenfassung

Durch die Unterschiede in der Aufteilung der Terme in der Transportgleichung der subfilter Dissipationsrate (7.55) und der Modellgleichung

$$\frac{D\epsilon_\Phi}{Dt} = \frac{C_D}{\ln(Sc)} \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right) \Phi^{*2} + C_s \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2} \epsilon_\Phi - C_d \frac{\epsilon_\Phi}{\Phi^{*2}} \epsilon_\Phi \quad (7.77)$$

konnten nur der Destruktionsterm und die Summe der Produktionsterme  $G_\epsilon + V_\epsilon$  direkt für die Parameterbestimmung verglichen werden. Aufgrund der Korrelationen der Eingangsgrößen ( $\epsilon$ ,  $\epsilon_\Phi$  und  $\Phi^{*2}$ ) ergab sich bei den Modellkonstanten eine  $Sc$  Abhängigkeit, die für hohe  $Sc$  nicht mehr zu erwarten ist. Daher wurde für die Bestimmung der Modellkonstanten nur der Fall  $Sc = 49$  herangezogen. Dabei bestimmen sich die Konstanten zu  $C_D = 0.02596$ ,  $C_s = 1.0$  und  $C_d = 2.76$ . Aufgrund der beobachteten Tendenz (gerade bei der Bestimmung von  $C_d$ ) werden im Limit von hohen  $Sc$  die Modellkonstanten mit  $C_D = 0.02$ ,  $C_s = 1.0$  und  $C_d = 3.0$  angesetzt, welche mit den Werten aus dem Spectral Relaxation Modell [13–16, 71] übereinstimmen. Für die Untersuchung des Modells im nächsten Kapitel werden die für die  $Sc$  geeigneten Parameter verwendet ( $C_s = 0.99$ ,  $C_D = 1.118$ ,  $C_d = 1.58 - 2.34$  für  $Sc = 3$  bis  $Sc = 25$ ,  $C_D = 0.02596$  und  $C_d = 2.76$  bei  $Sc = 49$ ). Es sei erwähnt, dass die leicht unterschiedlichen Transferfunktionen (Abbildung 7.1) der für die a priori Analyse verwendeten

Filterfunktionen sowie die geringe Stichprobenanzahl bei  $Sc = 49$  für geringe Variationen der Modellparameter verantwortlich sein können.



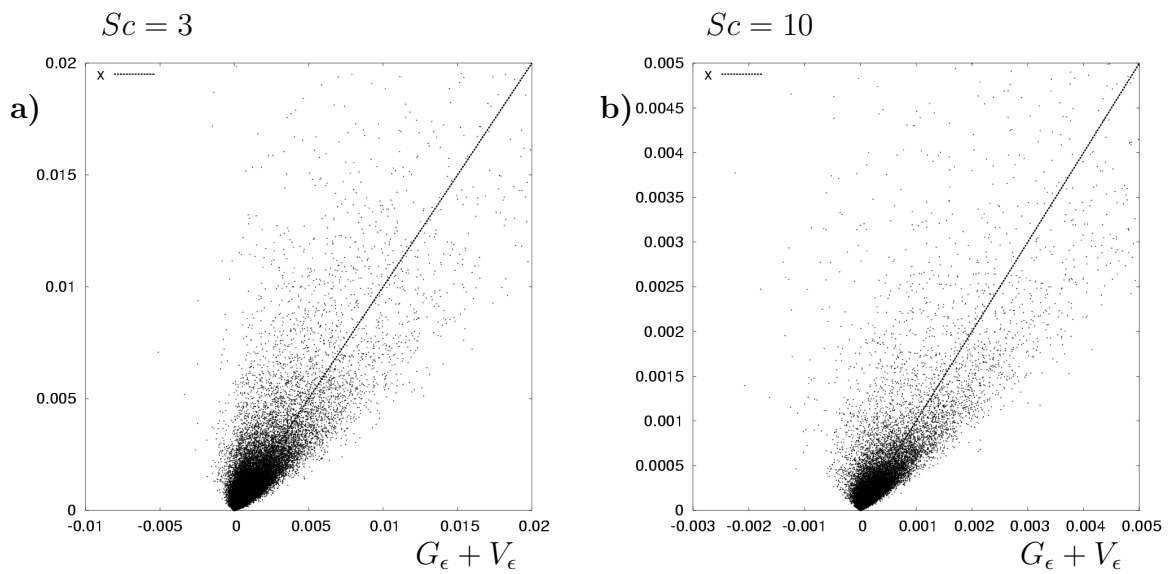
## 7.3 Analyse der Modellierung der subfilter Dissipationsrate

Im vorangegangenen Kapitel wurden die dominierenden Terme in der Transportgleichung der subfilter Dissipationsrate eines passiven Skalars identifiziert und Modelle für diese vorgeschlagen und entwickelt. Die Anpassung der Modellparameter erfolgte durch den Vergleich der auf die wandnormale Koordinate konditionierten Ensemble Mittelwerte. Die Modelle sollen für die DNS-FDF Simulation für turbulente Vermischung und chemische Reaktion verwendet werden. In der DNS-FDF Methode werden alle Skalen größer als die Kolmogorov Skala räumlich und zeitlich aufgelöst und die subfilter Skalen mit Hilfe von stochastischen Partikeln dargestellt. Diese stochastischen Partikel bewegen sich dabei durch die Strömung und erfahren daher eine räumlich und zeitlich fluktuierende Umgebung. Für eine korrekte Vorhersage der Dynamik der Mikromischens, und damit auch der chemischen Reaktion, genügt es nicht nur die Ensemble gemittelten Größen zu betrachten, sondern es sollte auch das lokale und instantane Verhalten des Modells der Dynamik der zu modellierende Transportgleichung entsprechen. Aus diesem Grund soll in diesem abschließenden Kapitel die Eigenschaft der vorgeschlagenen Modellierung bei einer instantanen und lokalen Betrachtung analysiert und mit den Daten aus der DNS der turbulenten Kanalströmung verglichen werden. Wie bereits erwähnt werden für  $Sc = 3$  bis  $Sc = 25$  die Parameter  $C_s = 0.99$ ,  $C_D = 1.118$  und  $C_d = 1.58 - 2.34$  verwendet und für  $Sc = 49$  die Parameter  $C_s = 1.0$ ,  $C_D = 0.02596$  und  $C_d = 2.76$ .

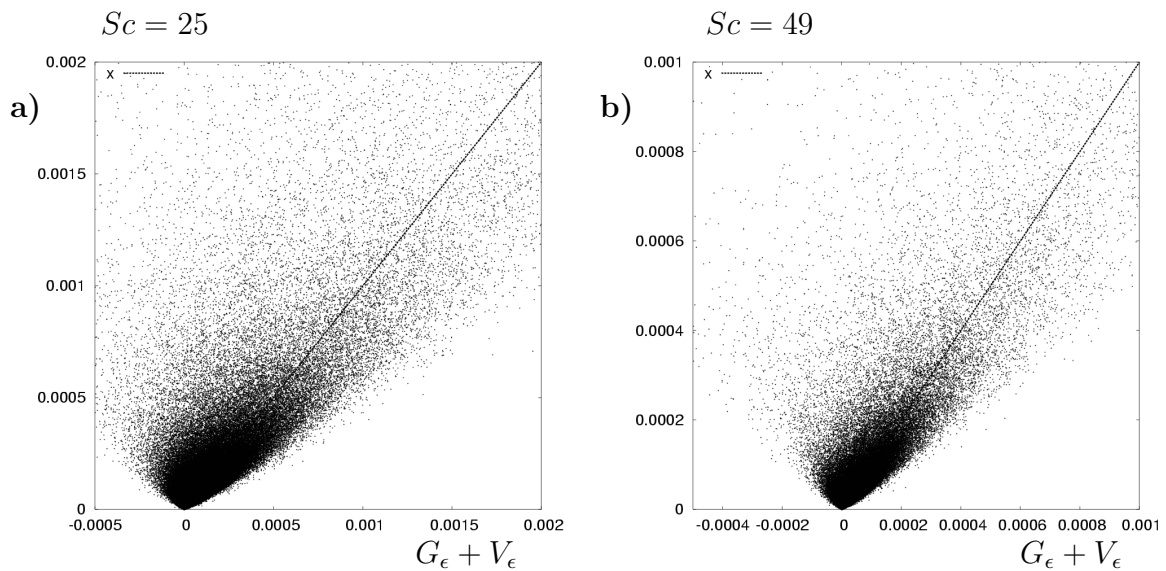
### 7.3.1 Analyse mittels Scatterplots

Im diesem ersten Abschnitt werden die Modelle für die Produktion und Dissipation mit den aus der DNS ermittelten Termen der Transportgleichung für die subfilter Dissipationsrate verglichen. Dazu werden wiederum Scatterplots herangezogen in denen die zu einem Zeitpunkt auf der Lagrange Bahn ermittelten DNS- und Modellgrößen ein Wertepaar bilden. In diesen Scatterplots ist auf der  $x$ -Achse die zu modellierende Größe, auf der  $y$ -Achse das Modell aufgetragen. Die einzelnen Punkte wurden auf den Lagrange Bahnen zu diskreten Zeitpunkten (Kapitel 7.1.2 und 4.4) gezogen. Der Wandeinfluss wurde dadurch entfernt dass nur Ereignisse betrachtet wurden, die entfernt der Wand, zwischen  $0.2 \leq z/H \leq 1.8$  stattfanden.

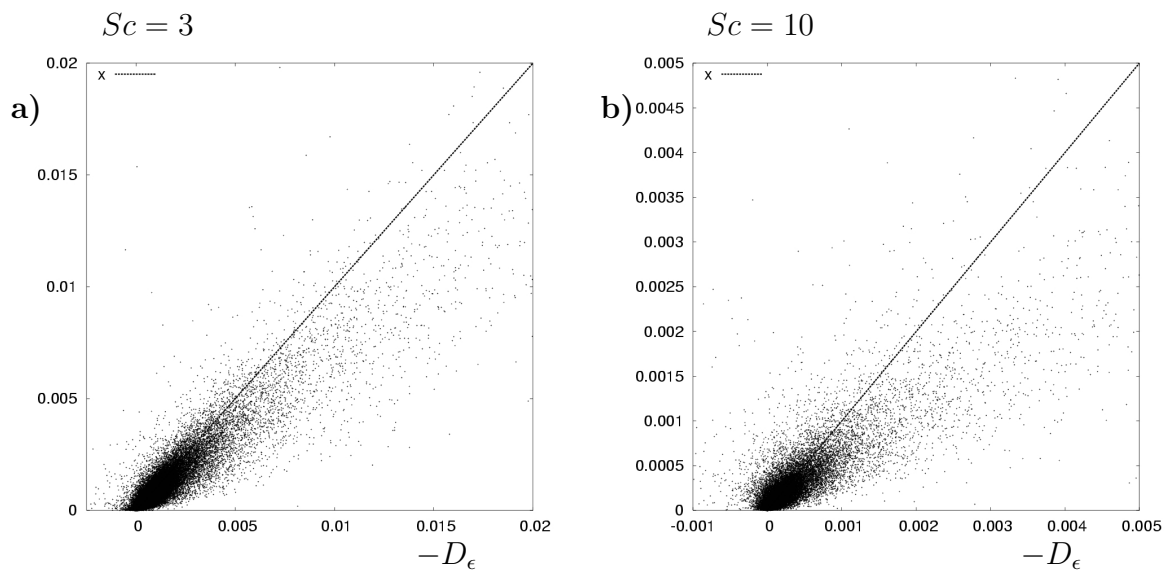
Die Scatterplots der instantanen und lokalen Stichproben zeigen bei den Modellen für Produktion und Dissipation eine gute Korrelation. Der Korrelationskoeffizient bewegt sich zwischen 0.88 bei  $Sc = 3$  und 0.74 bei  $Sc = 49$  für die Produktion und zwischen 0.88 und 0.93 für die Dissipation. Zusätzlich liegen die Punktepaare für beide Terme um die Winkelhalbierenden (Abbildung 7.27, 7.28, 7.29 und 7.30), was zeigt, dass die Modelle auch bei instantaner und lokalen Betrachtung der Terme entlang von Lagrange Bahnen gute Ergebnisse liefern können. Die Modelle für die Produktion liefern keine negativen Werte, wohingegen die aus der DNS extrahierten Terme durchaus leicht ins Negative reichen können. Die negativen Werte bei der Dissipation aus der DNS resultieren hingegen aus dem numerischen Fehler bei der Bestimmung der Dissipation der subfilter Dissipationsrate.



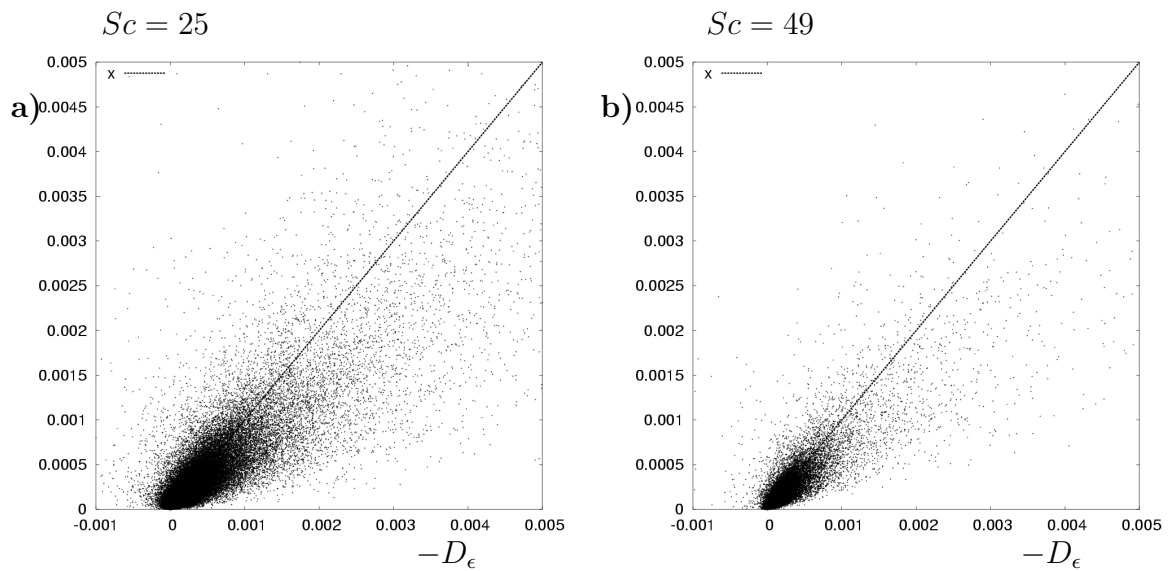
**Abbildung 7.27:** Modellierung von  $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73),  $x$ -Achse aus DNS,  $y$ -Achse Modell, Korrelationskoeffizient 0.88 bei  $Sc = 3$  und 0.84 bei  $Sc = 10$



**Abbildung 7.28:** Modellierung von  $G_\epsilon + V_\epsilon$ . Gleichung (7.73),  $x$ -Achse aus DNS,  $y$ -Achse Modell, Korrelationskoeffizient 0.82 bei  $Sc = 25$  und 0.76 bei  $Sc = 49$



**Abbildung 7.29:** Modellierung von  $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65),  $x$ -Achse aus DNS,  $y$ -Achse Modell; Korrelationskoeffizient 0.93 bei  $Sc = 3$  und 0.88 bei  $Sc = 10$



**Abbildung 7.30:** Modellierung von  $D_\epsilon$ . Gleichung (7.65),  $x$ -Achse aus DNS,  $y$ -Achse Modell; Korrelationskoeffizient 0.91 bei  $Sc = 25$  und 0.93 bei  $Sc = 49$

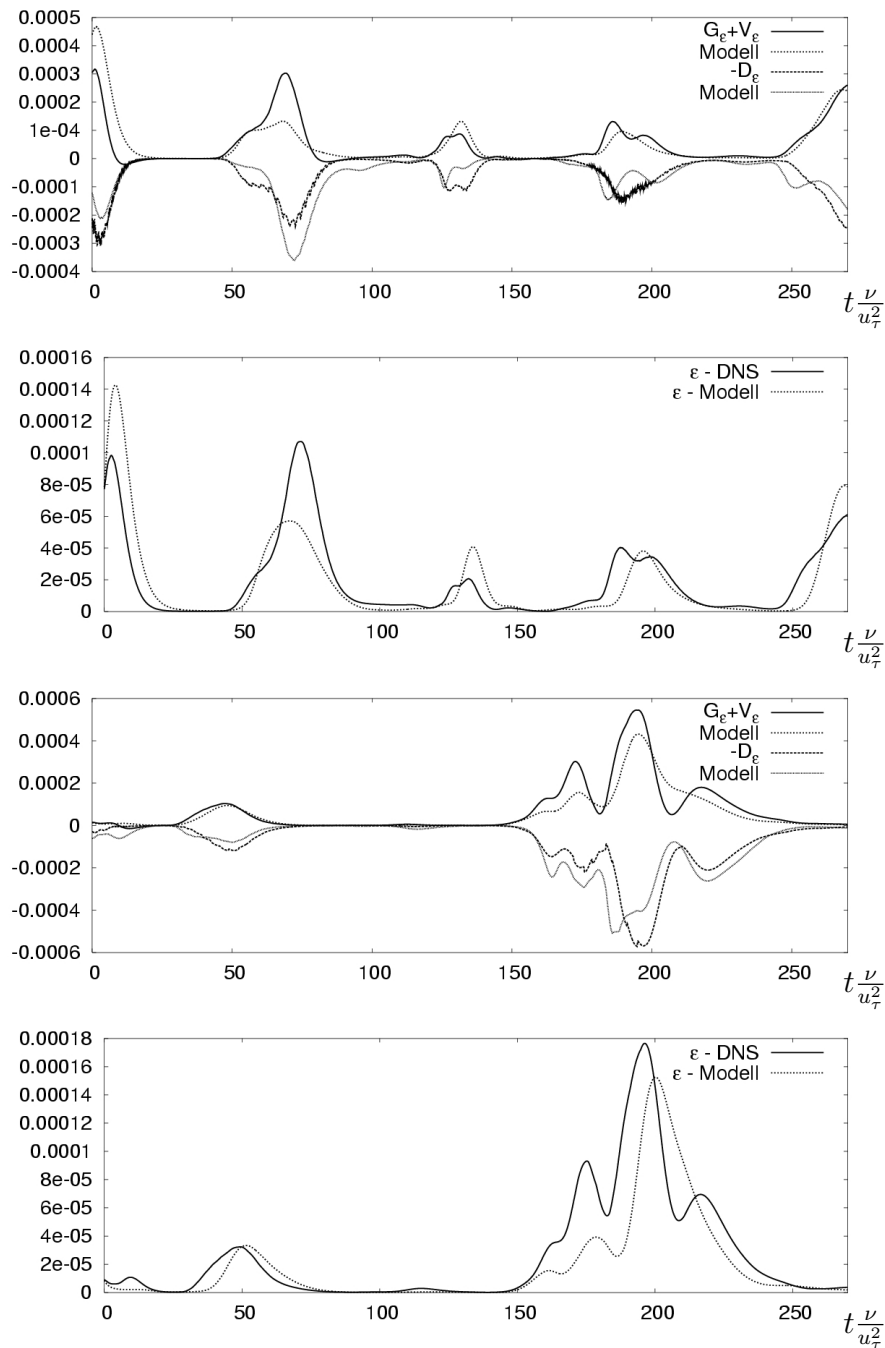
### 7.3.2 Analyse einzelner Lagrange Partikelbahnen

Das hier vorgestellte Modell soll letztendlich entlang der Lagrange Bahnen stochastischer Partikel angewandt werden, um für die Berechnung der Mischfrequenz für jedes Partikel eine skalare subfilter Dissipationsrate bereitzustellen. Dabei wird die vereinfachte Transportgleichung der subfilter Dissipationsrate (7.64) für jedes einzelne Partikel aufgestellt und die einzelnen Terme mit den im vorherigen Kapitel vorgestellten Modellen ersetzt. Die in den Modellen auftauchenden Größen sind aus der DNS der Strömung bzw. durch das gefilterte Skalarfeld in geschlossener Form vorhanden. In diesem Abschnitt soll nun die zeitliche Lösung der Modellgleichung bzw. der zeitliche Verlauf der modellierten Terme entlang der Lagrange Bahnen betrachtet werden. Die rechte Seite  $G_\epsilon + V_\epsilon - D_\epsilon$  der vereinfachten Transportgleichung (7.64) wird dabei mit der rechten Seite von Gleichung (7.77) modelliert. Die modellierte Dissipationsrate entlang der Lagrange Bahnen kann durch die Lösung der Differentialgleichung (7.77) mit einem expliziten Euler Verfahren bestimmt werden:

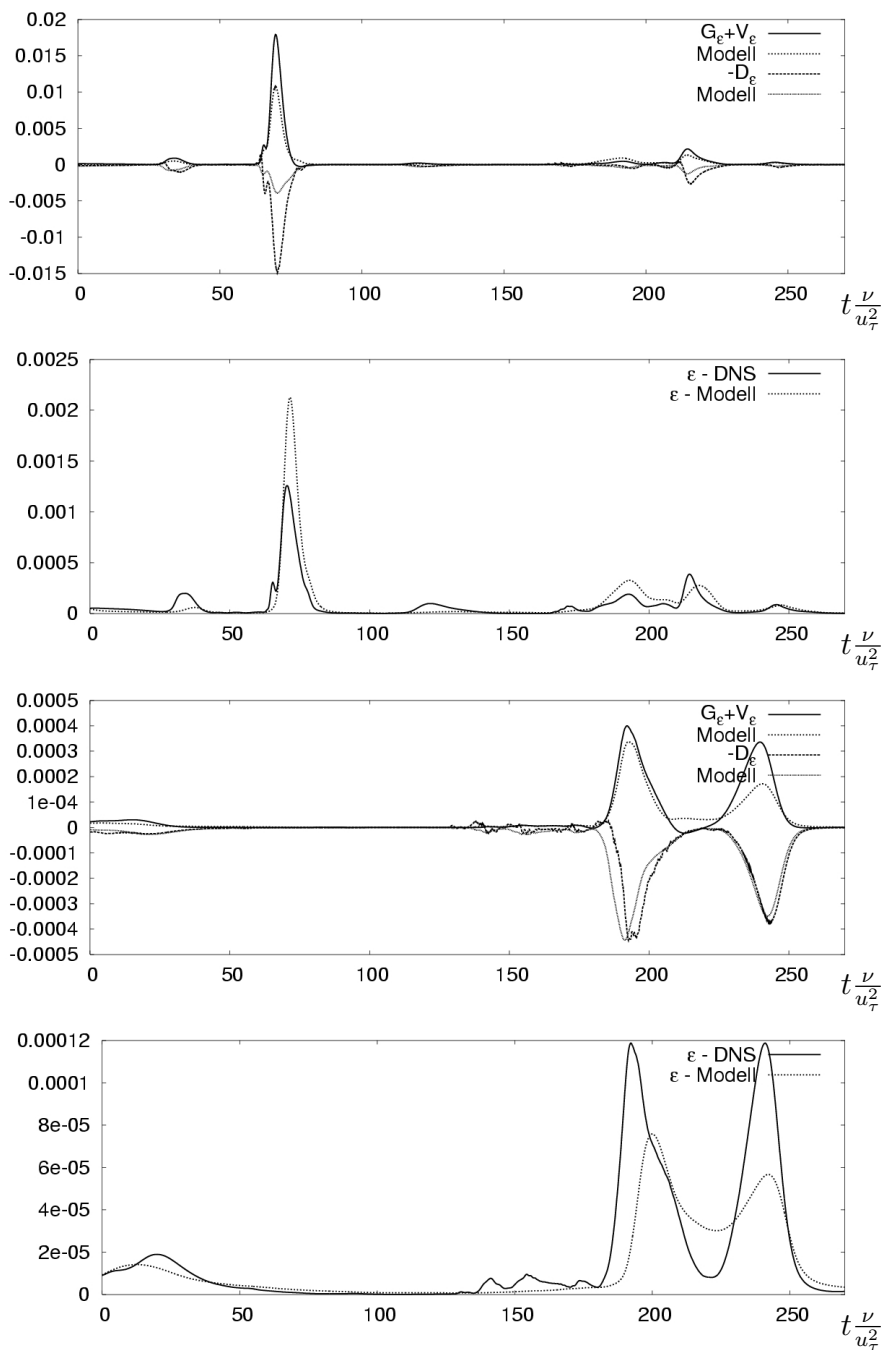
$$\epsilon_\Phi^+(t_N) = \epsilon_\Phi^+(t_{N-1}) + \Delta t \left( \frac{C_D}{\ln(Sc)} \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right) \Phi^{*2} + C_s \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2} \epsilon_\Phi^+(t_{N-1}) - C_d \frac{\epsilon_\Phi^{+2}(t_{N-1})}{\bar{\Phi}^2} \right). \quad (7.78)$$

Abbildungen 7.31 mit 7.34 zeigen zum einen den Verlauf der aus der DNS ausgewerteten rechten Seite von Gleichung (7.64) zusammen mit den Modelltermen der rechten Seite von Gleichung (7.78) entlang ausgewählter Lagrange Bahnen. Die Produktionsterme wurden in den Abbildungen zusammengefasst. Die Eingangsgrößen ( $\epsilon$ ,  $\Phi^{*2}$  und  $\bar{\Phi}^2$ ) auf der rechten Seite von Gleichung (7.78) wurden aus den DNS Daten auf den Lagrange Bahnen ausgewertet und sind auch bei einer vollen DNS-FDF Simulation in geschlossener Form vorhanden. Die Produktion ist positiv, die Dissipation negativ. Die  $z$ -Koordinaten der ausgewählten Bahnen befinden sich zwischen  $0.1 < z^+(t)/h < 1.78$ , erstrecken sich also fast über die gesamte Kanalhöhe. Für die gleichen Bahnen ist direkt darunter die zeitliche Entwicklung der skalaren subfilter Dissipationsrate aus der Lösung von Gleichung (7.78) zusammen mit der aus der DNS ermittelten subfilter Dissipationsrate aufgetragen. Zum Zeitpunkt  $t_0$  wurden die Bahnen mit der tatsächlich vorhandenen Dissipation initialisiert und anschließend mit einem expliziten Euler Verfahren in der Zeit integriert. In diesem Sinne stellt diese Untersuchung fast einen a posteriori Test dar, da nach der Initialisierung der Differentialgleichung (7.78) diese nur noch von, auch in einer DNS-FDF Simulation geschlossener Form vorhandenen Größen abhängt.

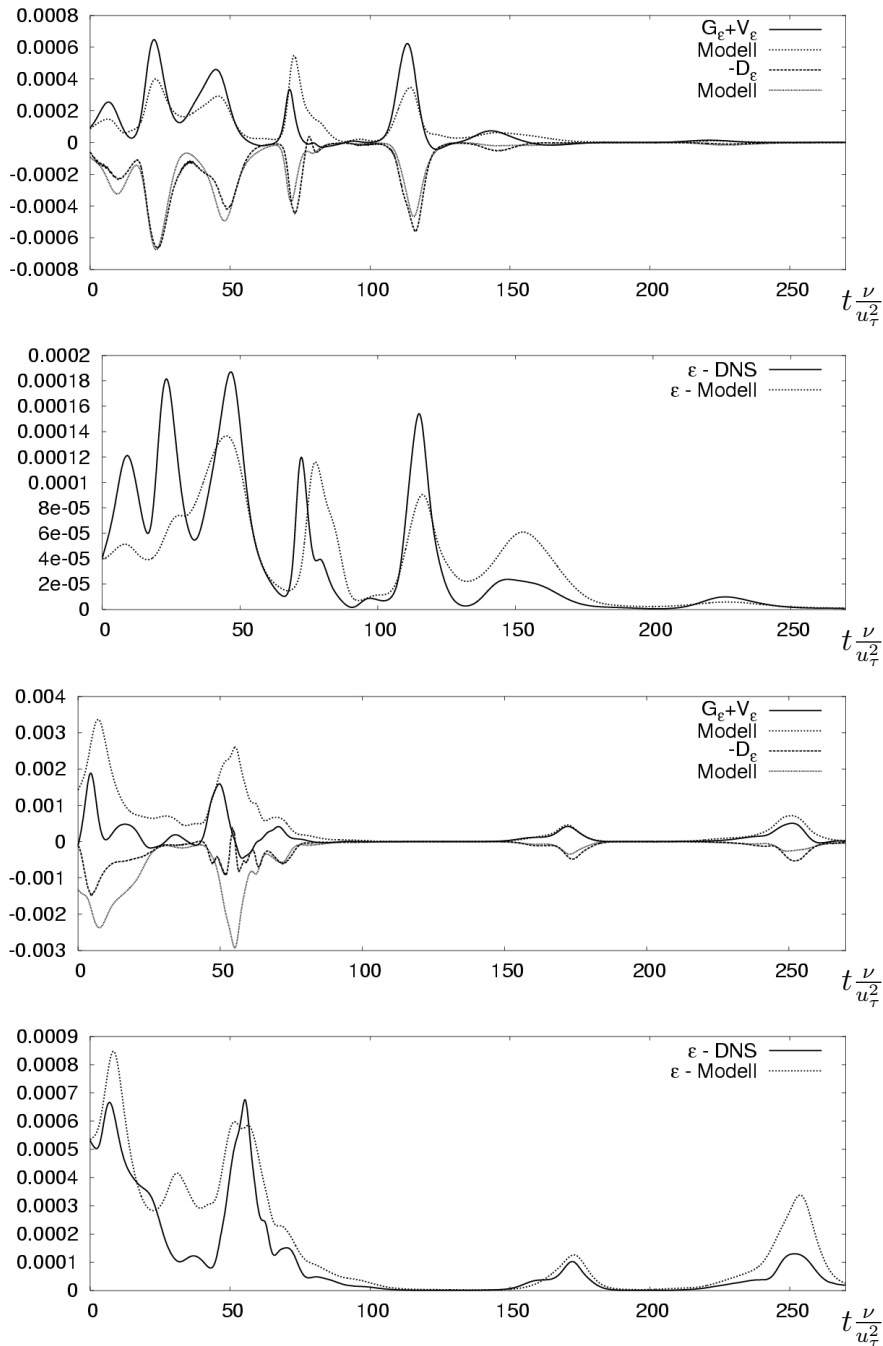
Die Abbildungen zeigen, dass die einzelne Verläufe der Terme aus der Transportgleichung der skalaren subfilter Dissipationsrate durch die Modelle gut abgebildet werden. Lage, Größenordnung und Dauer einzelner starker Ereignisse in Produktion und Dissipation werden bei allen  $Sc$  durch die Modelle gut getroffen. Dies führt dazu, dass die Modell-Differentialgleichung den zeitlichen Verlauf von  $\epsilon_\Phi$  gut wiedergeben kann. Außerdem erweist sich die Modell-DGL als stabil und kehrt daher auch nach einzelnen großen Abweichungen wieder in den Bereich der tatsächlichen Dissipationsrate zurück.



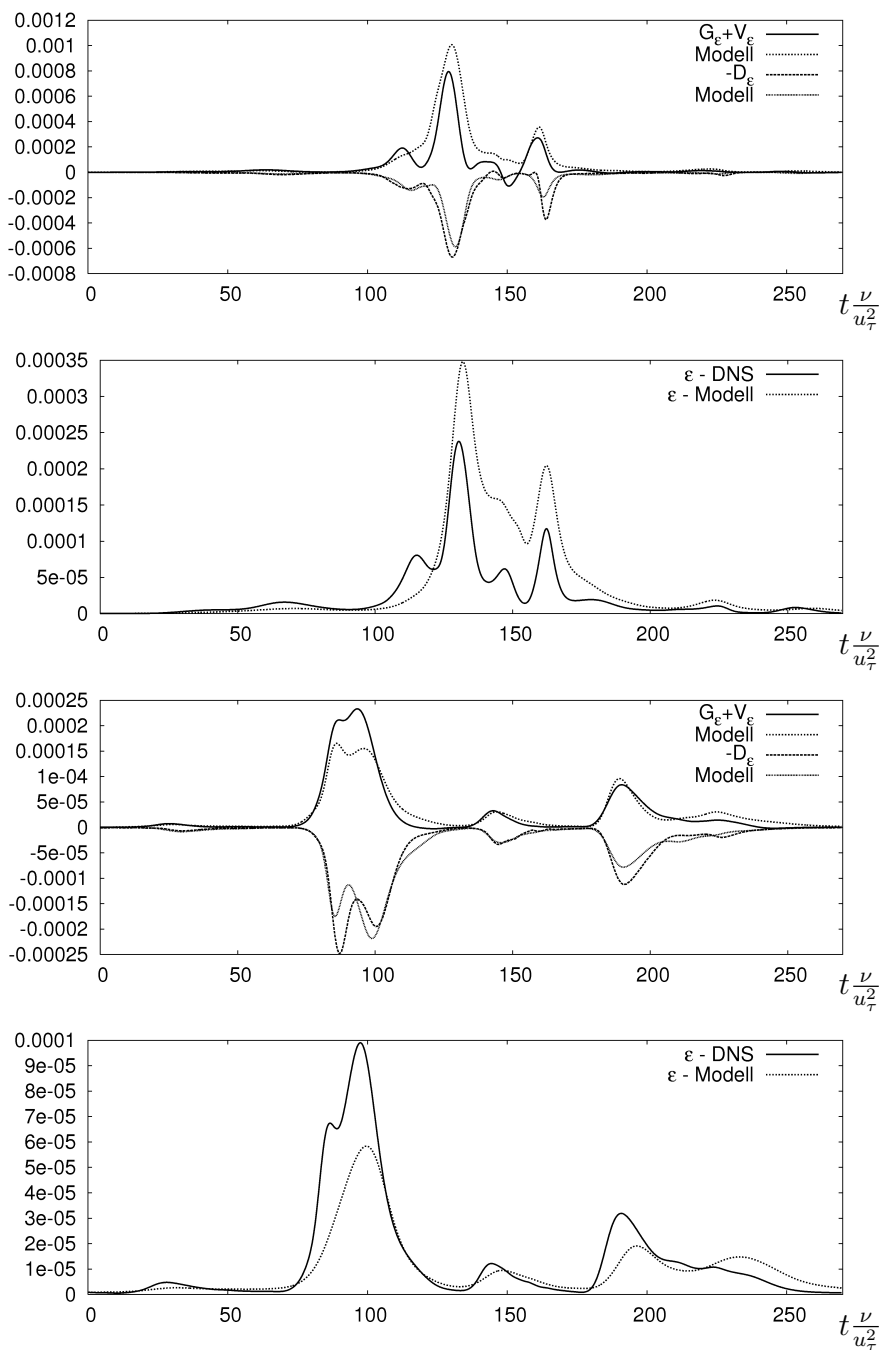
**Abbildung 7.31:** Zeitlicher Verlauf von Produktion und Dissipation in der vereinfachten Transportgleichung (7.64) aus DNS und Modell sowie der Vergleich der tatsächlichen mit der berechneten Dissipation  $\epsilon_\Phi^\dagger(t)$  entlang zweier ausgewählter Lagrange Bahnen bei  $Sc = 3$ .



**Abbildung 7.32:** Zeitlicher Verlauf von Produktion und Dissipation in der vereinfachten Transportgleichung (7.64) aus DNS und Modell sowie der Vergleich der tatsächlichen mit der berechneten Dissipation  $\epsilon_\Phi^\dagger(t)$  entlang zweier ausgewählter Lagrange Bahnen bei  $Sc = 10$ .



**Abbildung 7.33:** Zeitlicher Verlauf von Produktion und Dissipation in der vereinfachten Transportgleichung (7.64) aus DNS und Modell sowie der Vergleich der tatsächlichen mit der berechneten Dissipation  $\epsilon_\Phi^\dagger(t)$  entlang zweier ausgewählter Lagrange Bahnen bei  $Sc = 25$ .

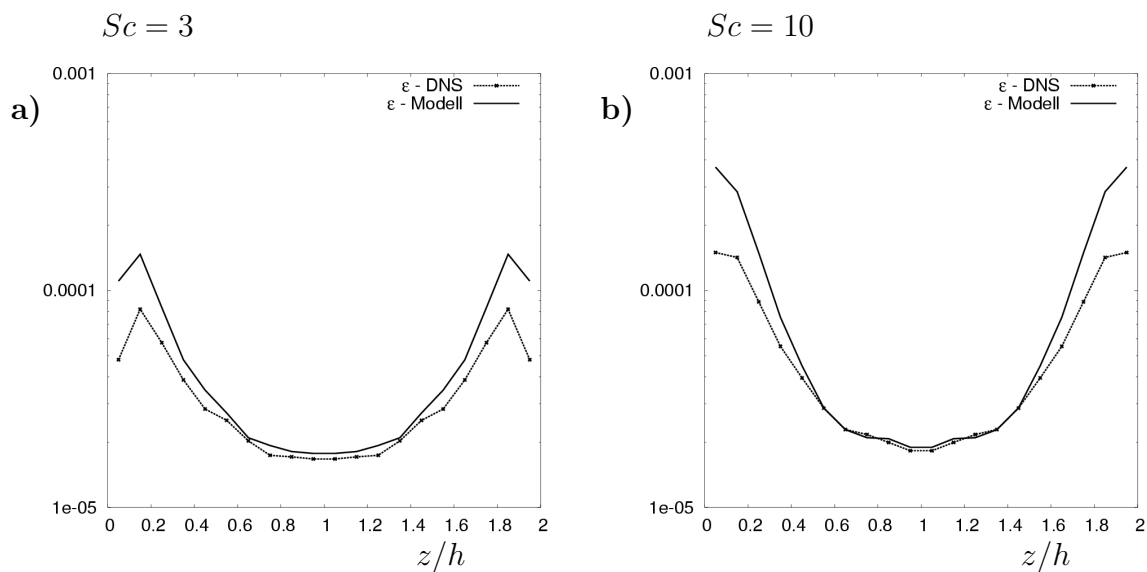


**Abbildung 7.34:** Zeitlicher Verlauf von Produktion und Dissipation in der vereinfachten Transportgleichung (7.64) aus DNS und Modell sowie der Vergleich der tatsächlichen mit der berechneten Dissipation  $\epsilon_\dagger^\dagger(t)$  entlang zweier ausgewählter Lagrange Bahnen bei  $Sc = 49$ .



### 7.3.3 Analyse der Ensemble gemittelten, modellierten subfilter Dissipationsrate

Um Information über die Qualität der Modellierung über alle Zeiten und alle Partikelbahnen zu gewinnen wurde eine, auf die wandnormale Koordinate konditionierte, Ensemble Mittelung der nach Gleichung (7.78) modellierten Dissipation und der tatsächlichen Dissipation mit allen Stichproben von allen Lagrange Bahnen durchgeführt. Die gemittelten Verläufe  $\langle \epsilon_{\Phi}(z) \rangle$  über die Kanalhöhe sind in den Abbildungen 7.35 und 7.36 für die verschiedenen  $Sc$  dargestellt.

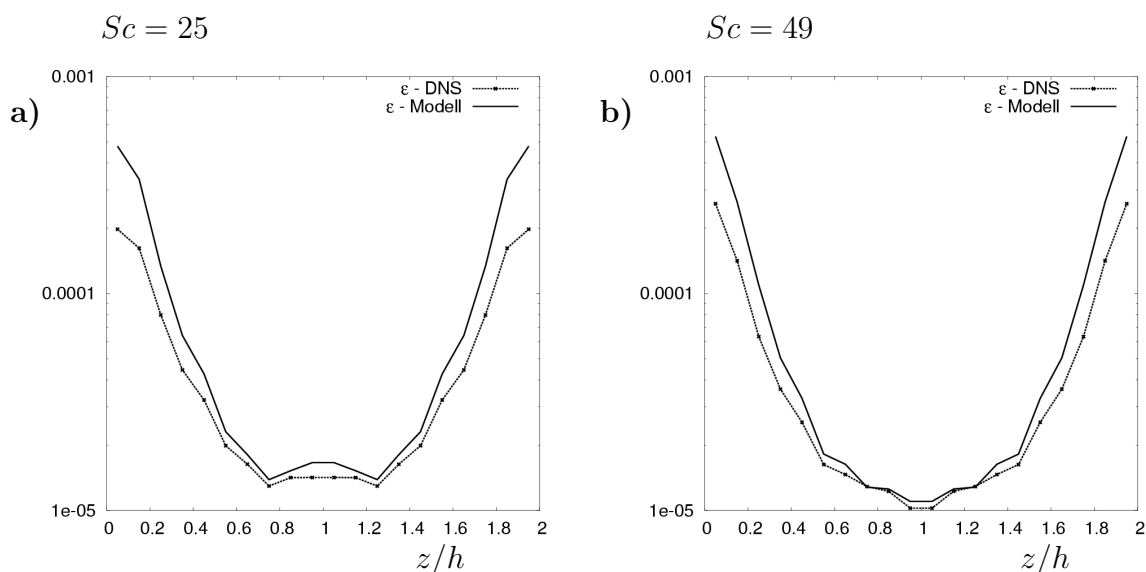


**Abbildung 7.35:** Vergleich der aus den Lagrange-Bahnen gebildeten Ensemble Mittelwerten  $\langle \epsilon_{\Phi} \rangle(z)$  aus der DNS und aus der Lösung der Modellgleichung (7.78)

Auch hier ist die Übereinstimmung zwischen Modell und DNS sehr gut. Die gemittelte Dissipation wird zwar in der Kanalmitte bei  $Sc = 3$  und  $Sc = 25$  leicht überschätzt, Verlauf und Größenordnung werden aber gut wiedergegeben. Für die Bereiche nahe den Wänden werden die Abweichungen größer, zeigen aber den gleichen Trend wie die Verläufe der Produktionsterme (Abbildung 7.23 und Abbildung 7.24) die für die Parameterbestimmung verwendet wurden. Dementsprechend ist es denkbar, dass eine Anpassung der Modellkonstanten in Wandnähe ausreichen könnte um die Wandeffekte mit einzubeziehen.

### 7.3.4 Zusammenfassung

Die Analyse der Modellierung zeigt eine gute Vorhersage der subfilter Dissipationsrate, sowohl instantan entlang einzelner Bahnen, als auch in Ensemble gemittelter Betrachtung über die Kanalhöhe. Das Modell ist in der Lage die Dynamik des Verlaufs der subfilter Dissipationsrate entlang von Lagrange Bahnen zu reproduzieren, und kann dementsprechend für die Bestimmung der Mischfrequenz im LMSE Modell in nicht homogenen Strömungen, die sich nicht im spektralen Gleichgewicht befinden, eingesetzt werden. Es werden keine



**Abbildung 7.36:** Vergleich der aus den Lagrange-Bahnen gebildeten Ensemble Mittelwerten  $\langle \epsilon_\Phi \rangle(z)$  aus der DNS und aus der Lösung der Modellgleichung (7.78)

expliziten Annahmen über das Verhältnis der kleinsten Strukturen im Skalarfeld zu den kleinsten Strukturen im Strömungsfeld getroffen, sondern das Verhältnis dieser Längenmaße als Lösung der modellierten Transportgleichung der subfilter Dissipationsrate dynamisch bestimmt. Da Wandeffekte bei der Modellierung ausgespart wurden und der Einfluss des gefilterten Skalargradienten vernachlässigt wurde, nimmt die Genauigkeit der Vorhersage erwartungsgemäß zur Wand hin ab. Da die Produktionsterme zur Wand hin allerdings systematisch überschätzt werden wohingegen die Destruktion richtig vorhergesagt wird, ist die systematische Überschätzung der subfilter Dissipationsrate nahe der Wand zu erwarten. Es ist daher denkbar, dass eine einfache Anpassung der Modellkonstanten für die Produktionsterme in Wandnähe ausreichen könnte um Wandeffekte in das Modell mit einzubeziehen.

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde für die Simulation von reaktiven Strömungen bei hohen Schmidt Zahlen eine Kombination aus einer DNS des Strömungsfeldes mit einer FDF des Skalarfeldes vorgeschlagen, was eine Neuerung gegenüber den bisherigen LES-FDF Simulationen darstellt. Für diese spezielle Kombination wurde die Transportgleichung der FDF hergeleitet. In dieser Gleichung sind alle Terme bis auf den Mikromischterm geschlossen vorhanden.

Für die Modellierung des Mikromischterms für den DNS-FDF Ansatz wurde das LMSE Modell vorgeschlagen. Da die Transportgleichung der FDF numerisch effizient mittels einer Monte-Carlo Simulation gelöst werden kann, wurde diese Modellierung anhand einer DNS turbulenter Kanalströmung mit Skalartransport bis zu  $Sc = 49$  zusammen mit der Auswertung entlang Lagrange'scher Bahnen a priori untersucht. Dabei wurde gezeigt, dass das LMSE Modell für die Modellierung des Mikromischterms sehr gut geeignet ist, da es sowohl Mittelwert und Varianz entlang Lagrange'scher Bahnen als auch die instantane Dynamik des Mikromischterms bei allen  $Sc$  sehr gut wiedergibt. Es konnte ferner gezeigt werden, dass in der Definition der Mischfrequenz die molekulare Diffusion der skalaren Varianz vernachlässigt werden kann, ohne dass die Leistungsfähigkeit des LMSE Modells nachlässt und dass diese Aussage mit steigender  $Sc$  bekräftigt wird. Außerdem wurde erarbeitet, dass zwei mögliche Formulierungen der Mikrovermischung in der Transportgleichung der FDF in Kombination mit dem LMSE Modell und bei hohen  $Sc$  ineinander übergehen. Dies hat seine Ursache darin, dass im Limit von hohen  $Sc$  die totale Dissipationsrate des Skalars mit der fluktuierenden subfilter Dissipationsrate des Skalars übereinstimmt und wegen der niedrigen molekularen Diffusion die räumliche Diffusion der FDF vernachlässigbar sind. Alle diese Ergebnisse hatten zur Folge dass das LMSE Modell in beiden möglichen Formulierungen der FDF Transportgleichung sehr gut für die Modellierung des Mikromischens geeignet ist, solange die in der Definition der Mischfrequenz auftauchende subfilter Dissipationsrate  $\epsilon_\phi$  bestimmt werden kann. Da diese Dissipationsrate in den subfilter Skalen und mit der "one-point one-time" FDF nicht berechnet werden kann, im Gegensatz zur subfilter Varianz, liegt die subfilter Dissipationsrate nicht geschlossen vor und muss wiederum modelliert werden.

Zur Entwicklung eines Modells für die subfilter Dissipationsrate wurde zuerst die exakte Transportgleichung dieser hergeleitet und in der DNS der turbulenten Kanalströmung ausgewertet. Damit konnte gezeigt werden, dass die Entwicklung der subfilter Dissipationsrate entlang Lagrange'scher Bahnen durch zwei Produktionsmechanismen und einem Dissipationsterm bestimmt ist und der molekulare Diffusionsterm sowie der nicht aufgelöste konvektive Term vernachlässigbar ist. Um diese Transportgleichung zu modellieren, wurden Ideen aus dem von Fox [13–15] vorgeschlagenen Spectral-Relaxation Modell übernommen

und eine Modell-Transportgleichung für die zeitliche Entwicklung der subfilter Dissipationsrate entlang der Lagrange'schen Bahnen aufgestellt und Term für Term mit der exakten Transportgleichung verglichen. Anhand dieser Auswertung konnten die aus dem SR-Modell verwendeten Modelle für die einzelnen Produktions- und Dissipationsmechanismen in der Transportgleichung von  $\epsilon_\Phi$  in der DNS-FDF Methode übernommen und angepasst werden. Für die Produktion durch den Wirbelstreckterm sowie der Destruktion der Dissipationsrate sind die Modelle fast identisch mit denen des SR-Modells und unterscheiden sich für den untersuchten  $Sc$  Bereich nur durch die Modellkonstanten. Die Produktion durch den Energietransfer von den aufgelösten zu den nicht aufgelösten Skalen wurde durch ein Produkt der skalaren Varianz nahe des Kolmogorov Längenmaßes mit dem inversen des Kolmogorov Zeitmaßes bestimmt. Die skalare Varianz wird dabei approximativ mit einer Fluktuation berechnet, welche durch die Differenz des aufgelösten Skalarfeldes und des gefilterten aufgelösten Skalarfeldes definiert ist. Der a priori Vergleich dieser Modelle mit der aus der DNS bestimmten Produktion und Dissipation zeigt im instantanen Scatterplot eine gute Übereinstimmung und auch der Verlauf entlang der Bahnen verdeutlicht, dass die Modelle die ablaufenden Produktions- und Destruktionsprozesse wiedergeben. Eine quasi a posteriori Untersuchung, bei der die Modelldifferentialgleichung für die einzelnen Bahnen gelöst wurde, zeigt dass das Modell stabil ist, die Dynamik der Dissipationsverläufe wiedergibt und durch die dissipative Eigenschaft auch einzelne Ausreißer in den Modelltermen den Verlauf der Dissipation nicht dauerhaft stören. Die aus dieser a posteriori Berechnung ermittelte Dissipation zeigt im Ensemble gemittelten Vergleich mit der tatsächlichen Dissipation eine sehr gute Übereinstimmung, die der durch die Anpassung der Modellparameter limitierten Übereinstimmung entspricht.

Diese Arbeit präsentiert damit ein vollständiges Modell zur Vorhersage der turbulenten Vermischung eines passiven Skalars für hohe Schmidt Zahlen. Durch die Kombination einer DNS der Strömung mit der FDF Simulation des Skalars liegt der Reaktionsterm geschlossen vor. Ein weiterer Vorteil ist, dass durch die DNS der Strömung der konvektive Term in der FDF Gleichung nicht modelliert werden muss. Der einzige zu modellierende Term ist der Mikromischterm, für welchen mit dem LMSE Modell zusammen mit einer modellierten Transportgleichung für die subfilter Dissipationsrate ein komplettes Modell erarbeitet wurde. Die a priori und a posteriori Analysen zeigen, dass man mit diesem Ansatz sehr gute Ergebnisse erwarten kann. Da die einzelnen modellierten Prozesse sehr nah an der Wirklichkeit sind, wie z. B. die Modellierung des Wirbelstreckterms, und das hier verwendete Verfahren, nach dem Wissen des Autors, der genaueste mögliche ist um die Vermischung bei hohen  $Sc$  im Detail vorherzusagen, bietet dieser Ansatz die Möglichkeiten, physikalische Zusammenhänge und Fragestellungen zum Mikromischen zu untersuchen.

Um die Modellierung der subfilter Dissipationsrate zu verbessern und zu verfeinern, sollten noch folgende Arbeiten durchgeführt werden: Um eine wirkliche eins zu eins Vergleichbarkeit<sup>1</sup> zwischen den Modelltermen und den Termen aus der exakten Transportgleichung herzustellen, müssten die Terme (7.59) und (7.60) umsortiert und nochmals ausgewertet werden. Bei diesem Schritt könnte auch versucht werden, die Produktion durch den gefilterten Gradienten aus dem Term (7.59) zu identifizieren und herauszulösen und dann ein Modell für diesen Term zu entwickeln. Damit könnte per se schon eine Verbesserung der Modellierung

<sup>1</sup>In dieser Arbeit wurde ja nur die Summe der Produktionsterme zwischen Modell und DNS verglichen

nahe den Wänden erreicht werden, da ja dort die gefilterten Gradienten erwartungsgemäß am größten sind, und dadurch eine genauere Bestimmung der Modellkonstanten möglich ist. Unter Umständen müssten für die Modellparameter funktionale Abhängigkeiten vom Wandabstand entwickelt werden, denn prinzipiell zeigen die Vergleiche zwischen DNS und Modell ja, dass das Verhalten durch eine Anpassung des Modellparameters nahe der Wand angeglichen werden könnte.

Eine weitere Arbeit besteht in der Anwendung des entwickelten Modells auf einen "echten" Fall. Dazu eignet sich besonders z. B. die Strömung und turbulente Vermischung in dem auch im Rahmen meiner Tätigkeit am Fachgebiet untersuchten T-Mischer. Zum einen findet die Strömung bei einer niedrigen Reynolds Zahl statt, zum anderen wurde eine DNS der Strömung schon erfolgreich durchgeführt und durch Experimente validiert [62]. Bei der dort vorliegenden Schmidt Zahl von  $Sc = 1930$  kann die Validierung der Mischmodellierung durch die experimentell ermittelten, gefilterten Skalarfelder auf der Skala des gefilterten Skalarfeldes durchgeführt werden. Das Mikromischen selbst kann durch den Vergleich der resultierenden Partikelgrößenverteilungen aus Experiment und Simulation validiert werden. Es ist bekannt, dass diese sehr sensitiv auf die Intensität des Mikromischen [61] reagieren. Außerdem wurden im Rahmen dieser Dissertation schon erste DNS-FDF Simulationen, zwar mit anderen Formulierungen für die Mischfrequenz, mit Kopplung mit der Partikelkinetik durchgeführt und die Machbarkeit und Sensitivität gegenüber der Reynolds Zahl getestet. Die Ergebnisse dieser Arbeiten sind hier noch nicht aufgeführt und sollen anderweitig veröffentlicht werden.

Langfristiges Ziel wäre es, den DNS-FDF Ansatz für eine LES-FDF zu erweitern. Dies grenzt sich gegenüber den bisherigen Simulationen mit der LES-FDF Methoden dadurch ab, dass man die Vermischung bei hohen  $Sc$  betrachtet, eine systematische Analyse der Modelle durchgeführt wurde, durch Vergleichbarkeit mit der DNS-FDF Methode Validierungsmöglichkeiten bestehen und die Entwicklung eines für die Mischfrequenz benötigten Modells für die skalare subfilter Dissipationsrate konzeptionell über die bisherigen Mischmodelle hinausgeht. Um dieses Modell konsequent für die LES-FDF Methode zu erweitern, müssten weitere Punkte aus dem SR-Modell übernommen werden und daher mehrere Differentialgleichungen für die zeitliche Entwicklung der skalaren Energie auf unterschiedlichen Wellenzahlbändern (Skalen im physikalischen Raum) entlang Lagrange'scher Bahnen aufgestellt und modelliert werden.



# Literaturverzeichnis

- [1] ANTONIA, R. ; KIM, J. : Turbulent Prandtl number in the near-wall region of a turbulent channel flow. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 34 (1991), Nr. 7, S. 1905–1908
- [2] BALDYGA, J. ; BOURNE, J. R.: *Turbulent Mixing and Chemical Reactions*. Chichester : Wiley, 1999
- [3] BATCHELOR, G. K.: Small-scale variation of convected quantities like temperature in turbulent fluid. Part 1. General discussion and the case of small conductivity. In: *J. Fluid Mech.* 5 (1959), S. 113–133
- [4] BATCHELOR, G. : *Fluid Dynamics*. Cambridge : Cambridge University Press, 1967
- [5] BERGANT, R. ; TISELJ, I. : Near wall passive scalar transport at high Prandtl numbers. In: *Phys. Fluids* 19 (2007)
- [6] BRETTHOUWER, G. ; HUNT, J. ; NIEUWSTADT, F. : Micro-structure and Lagrangian statistics of the scalar field with a mean gradient in isotropic turbulence. In: *J. Fluid Mech.* 474 (2003), S. 193–225
- [7] CHASNOV, J. : The viscous-convective subrange in nonstationary turbulence. In: *Phys. of Fluids* 10 (1998), Nr. 5, S. 1191–1205
- [8] COLUCCI, P. ; JABERI, F. A. ; GIVI, P. ; POPE, S. B.: Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows. In: *Phys. Fluids* 10 (1998), Nr. 2, S. 499–515
- [9] CORRSIN, S. : The decay of isotropic temperature fluctuations in an isotropic turbulence. In: *J. Aeronaut. Sci.* 18 (1951), S. 417
- [10] DOPAZO, C. ; O'BRIEN, E. E.: Isochoric turbulent mixing of two rapidly reacting chemical species with chemical heat release. In: *Phys. Fluids* 16 (1973), S. 2057
- [11] DOPAZO, C. ; O'BRIEN, E. E.: Statistical treatment of non-isothermal chemical reactions in turbulence. In: *Combust. Sci. Technol.* 13 (1976), S. 99
- [12] FERZIGER, J. ; PERIĆ, M. : *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 2nd. Berlin : Springer, 1997
- [13] FOX, R. O.: The spectral relaxation model of the scalar dissipation rate in homogeneous turbulence. In: *Phys. Fluids* 7 (1995), S. 1082–1094
- [14] FOX, R. : The Lagrangian spectral relaxation model of the scalar dissipation in homogeneous turbulence. In: *Phys. Fluids* 9 (1997), S. 2364–2386
- [15] FOX, R. : The Lagrangian spectral relaxation model for differential diffusion in homogeneous turbulence. In: *Phys. Fluids* 11 (1999), S. 1550–1570

- [16] FOX, R. : *Computational Models for Turbulent Reacting Flows*. Cambridge University Press, 2003
- [17] FRIEDRICH, R. : *Kompressible Strömungen mit Reibung und Wärmeleitung*. TU-München, Skriptum zur Vorlesung, 2000
- [18] GAO, F. ; O'BRIEN, E. E.: A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows. In: *Phys. Fluids A* 5 (1993), S. 1282
- [19] GARDINER, C. : *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and Natural Sciences*. Heidelberg : Springer, 1990
- [20] GIVI, P. : Model free simulation of turbulent reactive flows. In: *Prog. Energy Combust.* 15 (1989)
- [21] GRADL, J. ; SCHWERTFIRM, F. ; SCHWARZER, H. ; MANHART, M. ; PEUKERT, W. : Precipitation of Nanoparticles in a T-Mixer: Coupling the particle population balance with the hydrodynamics through direct numerical simulation. In: *Chem. Eng. and Proc.* 45 (2006), Nr. 10, S. 908–916
- [22] HARLOW, F. H. ; WELSH, J. E.: Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow with free surface. In: *Phys. Fluids* 8 (1965), S. 2182–2189
- [23] JOHANSSON, A. ; WIKSTRÖM, P. : DNS and modelling of passive scalar transport in turbulent channel flow with a focus on scalar dissipation rate modelling. In: *Flow, turbulence and combustion* 63 (1999), S. 233–245
- [24] KADER, B. : Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. In: *Int. J. Heat and Mass Transfer* 24 (1981), Nr. 9, S. 1541–1544
- [25] KAWAMURA, H. ; OHSAKA, K. ; ABE, H. ; YAMAMOTO, K. : DNS of turbulent heat transfer in channel flow with low to medium-high Prandtl number fluid. In: *Int. J. of Heat and Fluid Flow* 19 (1998), S. 482–491
- [26] KIM, J. ; MOIN, P. ; MOSER, R. : Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. In: *J. Fluid Mech.* 177 (1987), S. 133–166
- [27] KOLMOGOROV, A. : The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. In: *Dokl. Acad. Nauk. SSSR* 30 (1941), Nr. 301
- [28] KREUZINGER, J. : *Kompressibilitäts- und Dissipationseffekte in turbulenten Scherströmungen*, Technische Universität München, Diss., 2005
- [29] KUNDU, P. ; COHEN, M. : *Fluid Mechanics*. San Diego, California : Elsevier Academic Press, 2004
- [30] LE, P. ; PAPAVALASSIOU, D. : Turbulent Heat Transfer in Plane Couette Flow. In: *J. of Heat Transfer* 128 (2006), S. 53–62
- [31] LEEUVEN VAN, M. L. J. ; BRUINSMA, O. S. L. ; ROSMALEN VAN, G. M.: Computational Fluid Dynamics approach to precipitation reactions: The importance of subgrid-scale fluctuations. In: *Proc. Internat. Conf. on Mixing and Crystallization*. Tioman Island, Malaysia, 1998
- [32] LELE, S. K.: Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. In: *J. of Comp. Phys.* 103 (1992), S. 16–42



- [33] LIU, Y. ; FOX, R. : CFD predictions for chemical processing in a confined impinging-jets reactor. In: *AIChE Journal* 52 (2006), Nr. 2, S. 731–744
- [34] MANHART, M. : *Umströmung einer Halbkugel in turbulenter Grenzschicht*, Universität der Bundeswehr München, Diss., 1995
- [35] MANHART, M. : Investigation of a Turbulent Separating Boundary Layer by Direct Numerical Simulation. In: KRAUSE, E. (Hrsg.) ; JÄGER, W. (Hrsg.): *High Performance Computing in Science and Engineering 02*. Berlin : Springer, 2002, S. 285–298
- [36] MANHART, M. : A Coupled DNS/Monte-Carlo Solver for Dilute Suspensions of Brownian Fibres in Turbulent Channel Flow. In: EBNER, R. (Hrsg.) ; Technical University of Munich (Veranst.): *High Performance Computing in Science and Engineering, Munich 2004. Transactions of the Second Joint HLRB and KONWIHR Result and Reviewing Workshop*. Berlin : Springer-Verlag, 2004, S. 119–132
- [37] MANHART, M. : A zonal grid algorithm for DNS of turbulent boundary layers. In: *Computers and Fluids* 33 (2004), Nr. 3, S. 435–461
- [38] MANHART, M. ; FRIEDRICH, R. : DNS of a turbulent boundary layer with separation. In: *Int. J. Heat and Fluid Flow* 23 (2002), Nr. 5, S. 572–581
- [39] MARCHISIO, D. ; VIGIL, R. ; FOX, R. : Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes. In: *J. of Colloid and Interface Science* 258 (2003), S. 322–334
- [40] MEYER, D. ; JENNY, P. : Conservative velocity interpolation for PDF methods. In: *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics* 4 (2004), Nr. 1, S. 466–467
- [41] MITARAI, S. ; RILEY, J. ; KOSALY, G. : Testing of mixing models for Monte Carlo probability density function simulations. In: *Phys. Fluids* 17 (2005), Nr. 4
- [42] MITROVIC, B. ; LE, P. ; PAPAVALASSILOU, D. : On the Prandtl or Schmidt number dependence of the turbulent heat or mass transfer coefficient. In: *Chem. Eng. Sci.* 59 (2004), S. 543–555
- [43] NA, Y. : In: *Private Communication* (2005)
- [44] NA, Y. ; HANRATTY, T. J.: Limiting behaviour of turbulent scalar transport close to a wall. In: *Int. J. of Heat and Mass Transfer* 43 (2000), S. 1749–1758
- [45] NA, Y. ; PAPAVALASSILOU, D. V. ; HANRATTY, T. J.: Use of direct numerical simulation to study the effect of Prandtl number on temperature field. In: *Int. J. Heat and Fluid Flow* 20 (1999), S. 187–195
- [46] O'BRIEN, E. E.: The Probability Density Function (pdf) Approach to Reacting Turbulent Flows. In: LIBBY, P. (Hrsg.) ; WILLIAMS, F. (Hrsg.): *Turbulent Reacting Flows, Topics in Applied Physics*. Heidelberg : Springer, 1980 (Turbulent Reacting Flows, Topics in Applied Physics), S. 185–218
- [47] OBUKHOV, A. : The structure of the temperature field in a turbulent flow. In: *Izv. Akad. Nauk. SSSR, Ser. Geogr. and Geophys.* 13 (1949), S. 58–69
- [48] PAPAVALASSILOU, D. ; HANRATTY, T. J.: Transport of a passive scalar in a turbulent channel flow. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 40 (1997), Nr. 6, S. 1303–1311
- [49] POPE, S. B.: A Monte Carlo method for the PDF equations of turbulent reactive flow. In: *Combust. Sci. Technol.* 25 (1981), S. 159

- [50] POPE, S. B.: PDF methods for turbulent reactive flows. In: *Prog. Energy Combust. Sci.* 11 (1985), S. 119
- [51] POPE, S. B.: *Turbulent Flows*. Cambridge : Cambridge University Press, 2000
- [52] POPE, S. : The statistical theory of turbulent flames. In: *Philos. Trans. R. Soc. London* 529 (1979)
- [53] POPE, S. : Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows. In: *Annu. Rev. Fluid Mech.* 26 (1994), S. 23–63
- [54] POVITSKY, A. ; MORRIS, P. : A Higher-Order Compact Method in Space and Time Based on Parallel Implementation of the Thomas Algorithm. In: *J. of Comp. Phys.* 161 (2000), S. 182–203
- [55] RAMAN, V. ; PITSCH, H. ; FOX, R. : Hybrid large-eddy simulation/Lagrangian filtered-density-function approach for simulating turbulent combustion. In: *Combustion and Flame* 143 (2005), S. 56–78
- [56] RICHARDSON, L. : *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge : Cambridge University Press, 1922
- [57] SCHWARZER, H. C. ; MANHART, M. ; PEUKERT, W. : Characterization of mixing in a T-mixer: A combined experimental and numerical study. In: *Proc. 11th Europ. Conf. on Mixing*. Bamberg, 14.-17- Okt., 2003, S. 113–120
- [58] SCHWARZER, H. C. ; SCHWERTFIRM, F. ; MANHART, M. ; PEUKERT, W. : Predictive Simulation of Nanoparticle Precipitation based on Population Balance Equation. In: *Proc. 2nd Int. Conf. on Population Balance Modeling (PBM2004)*. Valencia, Spain, 5.-7. Mai 2004
- [59] SCHWARZER, H. C. ; SCHWERTFIRM, F. ; MANHART, M. ; SCHMID, H. J. ; PEUKERT, W. : Predictive Simulation of Nanoparticle Precipitation based on the Population Balance Equation. In: *Chem. Eng. Sci.* 61 (2006), S. 167–181
- [60] SCHWARZER, H. C. ; SCHWERTFIRM, F. ; MANHART, M. ; SCHMID, H. J. ; PEUKERT, W. : Predictive Simulation of Nanoparticle Precipitation based on the Population Balance Equation. In: *Chem. Eng. Sci.* 61 (2006), S. 167–181
- [61] SCHWARZER, H. : *Nanoparticle Precipitation - an experimental and numerical investigation including mixing*, Universität Erlangen-Nürnberg, Diss., 2004
- [62] SCHWERTFIRM, F. ; GRADL, J. ; SCHWARZER, H. ; MANHART, M. ; PEUKERT, W. : The low Reynolds number turbulent flow and mixing in a Confined Impinging Jet Reactor. In: *Int. J. Heat and Fluid Flow* 28 (2007), S. 1429–1442
- [63] SCHWERTFIRM, F. ; MANHART, M. : ADM Modelling for Semi-Direct Numerical Simulation of Turbulent Mixing and Mass Transport. In: HUMPHREY, J. (Hrsg.) ; GATSKI, T. (Hrsg.) ; EATON, J. (Hrsg.) ; FRIEDRICH, R. (Hrsg.) ; KASAGI, N. (Hrsg.) ; LESCHZINER, M. (Hrsg.): *Turbulence and Shear Flow Phenomena*. Williamsburg, USA, 2005, S. 823–828
- [64] SCHWERTFIRM, F. ; MATHEW, J. ; MANHART, M. : Improving spatial resolution characteristics of finite difference and finite volume schemes by approximate deconvolution pre-processing. In: *Computers and Fluids* (2007), S. accepted

- [65] SEKI, Y. ; IWAMOTO, K. ; KAWAMURA, H. : Prandtl number Effect on Turbulence Quantities through High Spatial Resolution DNS of Turbulent Heat Transfer in a Channel Flow. In: HANJALIC, K. (Hrsg.) ; NAGANO, Y. (Hrsg.) ; S., J. (Hrsg.): *Turbulence, Heat and Mass Transfer 5*, Begell House Inc., 2006, S. 301–304
- [66] SHAW, D. A. ; HANRATTY, T. J.: Turbulent mass transfer to a wall for large Schmidt numbers. In: *A.I.Ch.E.J.* 23 (1977), Nr. 1, S. 28–37
- [67] SPALDING, D. : Concentration fluctuations in a round turbulent free jet. In: *Chem. Eng. Sci.* 26 (1971), S. 95–107
- [68] STOLZ, S. ; ADAMS, N. A. ; KLEISER, L. : An approximate deconvolution model for large-eddy simulation with application to incompressible wall-bounded flows. In: *Phys. Fluids* 13 (2001), Nr. 4, S. 997–1015
- [69] STOLZ, S. ; ADAMS, N. : An approximate deconvolution procedure for large-eddy simulation. In: *Phys. of Fluids* 11 (1999), Nr. 7, S. 1699–1701
- [70] TENNEKES, H. ; LUMLEY, J. : *A first course in turbulence*. Cambridge, Massachusetts : MIT Press, 1972
- [71] VEDULA, P. ; YEUNG, P. ; FOX, R. : Dynamics of scalar dissipation in isotropic turbulence: a numerical and modelling study. In: *J. Fluid Mech.* 433 (2001), S. 29–60
- [72] VILLERMAUX, J. : Micromixing phenomena in stirred reactors. In: *Encyclopedia of Fluid Mechanics*. Houston, Texas : Gulf Pub Co, 1986
- [73] WERNER, H. : *Grobstruktursimulation der turbulenten Strömung über eine querliegende Rippe in einem Plattenkanal bei hoher Reynoldszahl*. München, Technische Universität München, Diss., 1991
- [74] WILLIAMSON, J. H.: Low-storage Runge-Kutta schemes. In: *J. of Comp. Phys.* 35 (1980), Nr. 48, S. 48–56

# A Anhang

## A.1 FDF-Transportgleichung

### A.1.1 Definition und Eigenschaften der FDF

Zur besseren Vergleichbarkeit und Lesbarkeit werden die Fachbegriffe in diesem Kapitel nicht ins Deutsche übersetzt. Die Herleitung und die Bezeichnungen folgen [8], [51].

Die “fine-grained” Dichte für den Skalar ist definiert als:

$$\varrho [\vec{\Psi}, \vec{\Phi}(\vec{x}, t)] = \delta [\vec{\Psi} - \vec{\Phi}(\vec{x}, t)] . \quad (\text{A.1})$$

Vereinfacht hier für nur eine Spezies:

$$\varrho [\Psi, \Phi(x_i, t)] = \delta [\Psi - \Phi(x_i, t)] . \quad (\text{A.2})$$

Dabei ist  $\delta$  die Dirac-Funktion, welche  $\infty$  ist falls  $\Psi = \Phi(x_i, t)$ .  $\Phi(x_i, t)$  ist die zu beschreibende Zufallsgröße und  $\Psi$  die Variable. Wird die “fine-grained” Dichte nun gewichtet mit einem Filter  $G(x_i)$  um den Ort  $x_i$  herum integriert erhält man die “filtered-density function” (FDF):

$$P_L(\Psi; x_i, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varrho [\Psi, \Phi(x'_i, t)] G(x'_i - x_i) dx'_i. \quad (\text{A.3})$$

Mit der Definition eines positiven Filter-Kernels hat die FDF alle Eigenschaften einer PDF. Somit gibt  $P_L(\Psi; x_i, t)$  die Dichte im Zustandsraum in der Umgebung  $x_i + x'_i$  gewichtet mit dem Filter  $G(x_i)$  an. Möchte man z.B. den gefilterten Erwartungswert einer Größe  $Q(x_i, t) = Q(\Phi(x_i, t))$ , welche nur von  $\Phi(x_i, t)$  abhängig ist (z.B. der Reaktionsrate), berechnen, so muss über den ganzen Zustandsraum integriert werden:

$$\overline{Q(x_i, t)} = \int \int_{-\infty}^{+\infty} Q(x_i, t) \varrho [\Psi, \Phi(x'_i, t)] G(x'_i - x_i) dx'_i d\Psi, \quad (\text{A.4})$$

was im Falle, dass  $Q$  nur von  $\Phi$  abhängig gleichbedeutend ist mit:

$$\overline{Q(x_i, t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) P_L(\Psi; x_i, t) d\Psi . \quad (\text{A.5})$$

Den ‘‘conditional filtered value’’ Wert von  $Q$  erhält man, wenn man nur über den Ort integriert und mit der FDF normiert:

$$\overline{Q(x_i, t)|\Psi} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} Q(x'_i, t) \varrho[\Psi, \Phi(x'_i, t)] G(x'_i - x_i) dx'_i}{P_L(\Psi; x_i, t)} . \quad (\text{A.6})$$

$\overline{Q(x_i, t)|\Psi}$  entspricht also dem gefilterten Wert der Funktion  $Q$  unter der Bedingung, dass  $\Phi = \Psi$  ist.

Es lassen sich folgende Eigenschaften zusammenfassen:

- Falls  $Q$  konstant ist, ist auch der ‘‘conditional filtered value’’ konstant:

$$\text{falls } Q(x_i, t) = c, \text{ dann } \overline{Q(x_i, t)|\Psi} = c . \quad (\text{A.7})$$

- Falls  $Q(x_i, t) = \hat{Q}(\Psi(x_i, t))$  nur von  $\Psi(x_i, t)$  abhängt, also vollständig durch  $\Psi$  beschrieben werden kann, kann  $Q(x_i, t)$  aus dem Integral (A.6) gezogen werden (‘‘sifting property’’ der Dirac Funktion):

$$\overline{Q(x_i, t)|\Psi} = \hat{Q}(\Psi) . \quad (\text{A.8})$$

- Der gefilterte Wert von  $Q(x_i, t)$  ergibt sich aus der Integration über den Zustandsraum:

$$\overline{Q(x_i, t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{Q(x_i, t)|\Psi} P_L(\Psi; x_i, t) d\Psi . \quad (\text{A.9})$$

## A.1.2 Herleitung der FDF Transportgleichung

Zur Herleitung der FDF-Transportgleichung für einen passiven Skalar aus der Skalartransportgleichung wird die Zeitableitung von Gleichung (A.3) betrachtet:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P_L(\Psi; x_i, t)}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \varrho[\Psi, \Phi(x_i, t)]}{\partial \Phi(x'_i, t)} \frac{\partial \Phi(x'_i, t)}{\partial t} G(x'_i - x_i) dx'_i \\
&= - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Phi(x'_i, t)}{\partial t} \frac{\partial \varrho[\Psi, \Phi(x_i, t)]}{\partial \Psi} G(x'_i - x_i) dx'_i \\
&= - \frac{\partial}{\partial \Psi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Phi(x'_i, t)}{\partial t} \varrho[\Psi, \Phi(x_i, t)] G(x'_i - x_i) dx'_i.
\end{aligned} \tag{A.10}$$

Benutzt man jetzt die Definition für den “conditional filtered value” einer Funktion  $Q(x_i, t)$  nach A.6, so ergibt sich:

$$\frac{\partial P_L(\Psi; x_i, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \Psi} \left[ \overline{\left( \frac{\partial \Phi}{\partial t} \middle| \Psi \right)} P_L(\Psi; x_i, t) \right]. \tag{A.11}$$

Jetzt kann man die skalare Transportgleichung für die zeitliche Änderung des Skalars in Gleichung (A.11) einsetzen und man erhält:

$$\frac{\partial}{\partial \Psi} \left\{ \left[ \overline{\left( \frac{\partial u_i \Phi}{\partial x_i} \middle| \Psi \right)} - \overline{\left( \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) \middle| \Psi \right)} - \overline{(\omega(\Phi) | \Psi)} \right] P_L(\Psi; x_i, t) \right\} = \frac{\partial P_L(\Psi; x_i, t)}{\partial t}. \tag{A.12}$$

Die einzelnen Terme dieser Gleichung können nun weiter umgeformt und vereinfacht werden.

### Konvektiver Term

Mit Hilfe von Gleichung A.6 ergibt sich für den konvektiven Term:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \Psi} \left( \overline{\frac{\partial u_i \Phi}{\partial x_i} \middle| \Psi} \right) P_L &= \frac{\partial}{\partial \Psi} \int_{-\infty}^{+\infty} u_i \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \varrho [\Psi, \Phi(x'_i, t)] G(x'_i - x_i) dx'_i \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} u_i \frac{\partial \varrho [\Psi, \Phi(x'_i, t)]}{\partial \Psi} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} G(x'_i - x_i) dx'_i \\
&= - \int_{-\infty}^{+\infty} u_i \frac{\partial \varrho [\Psi, \Phi(x'_i, t)]}{\partial \Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} G(x'_i - x_i) dx'_i \\
&= - \int_{-\infty}^{+\infty} u_i \frac{\partial \varrho [\Psi, \Phi(x'_i, t)]}{\partial x_i} G(x'_i - x_i) dx'_i .
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Bei einer DNS des Strömungsfeldes ist die Geschwindigkeit  $u_i$  konstant, bzw. besitzt einen konstanten Gradienten innerhalb der Filterweite von  $G(x_i + x'_i)$ . Damit kann die Geschwindigkeit, bei einem geringen Fehler, aus dem Integral gezogen werden (siehe auch [63]). Somit ergibt sich für den konvektiven Term:

$$\frac{\partial}{\partial \Psi} \left( \overline{\frac{\partial u_i \Phi}{\partial x_i} \middle| \Psi} \right) P_L = -u_i \frac{\partial P_L}{\partial x_i} . \tag{A.14}$$

### Diffusiver Term

Der diffusive Term lautet bei konstantem (und für jede Spezies identischem)  $\Gamma$ :

$$\begin{aligned}
- \frac{\partial}{\partial \Psi} \left( \overline{\frac{\partial}{\partial x_i} \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \middle| \Psi} \right) &= - \frac{\partial}{\partial \Psi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x_i} \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \varrho [\Psi, \Phi(x'_i, t)] G(x'_i - x_i) dx'_i \\
&= - \Gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2} \frac{\partial \varrho [\Psi, \Phi(x'_i, t)]}{\partial \Psi} G(x'_i - x_i) dx'_i .
\end{aligned} \tag{A.15}$$

Beachtet man nun, dass für die partielle Differentiation von  $\varrho [\Psi, \Phi]$  nach  $x$  gilt:

$$\frac{\partial \varrho [\Psi, \Phi]}{\partial x_i} = - \frac{\partial \varrho [\Psi, \Phi]}{\partial \Psi} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \tag{A.16}$$

$$\frac{\partial^2 \varrho [\Psi, \Phi]}{\partial x_i^2} = \frac{\partial^2}{\partial \Psi^2} \varrho [\Psi, \Phi] \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial \Psi} \varrho [\Psi, \Phi] \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2} , \tag{A.17}$$

so kann der Integrand in Gleichung A.15 umgeformt werden:

$$- \Gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2} \frac{\partial \varrho [\Psi, \Phi]}{\partial \Psi} G(x'_i - x_i) dx_i = \quad (\text{A.18})$$

$$\Gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\partial^2 \varrho [\Psi, \Phi]}{\partial x_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial \Psi^2} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \varrho [\Psi, \Phi] \right) G(x'_i - x_i) dx'_i . \quad (\text{A.19})$$

Damit ergibt sich schließlich für den diffusiven Term:

$$\frac{\partial}{\partial \Psi} \left[ - \overline{\left( \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) \middle| \Psi \right) P_L} \right] = \Gamma \frac{\partial^2 P_L}{\partial x_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial \Psi^2} \left[ \Gamma \overline{\left( \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \middle| \Psi \right) P_L} \right] . \quad (\text{A.20})$$

Diese Aufspaltung des diffusiven Terms in eine räumliche Diffusion der FDF und eine Dissipation im Zustandsraum findet bei Colucci et. al. ([8]) Verwendung und wurde von O'Brian ([46]) benutzt. Alternativ dazu spaltet Raman et. al. ([55]) den diffusiven Term in aufgelösten und fluktuierenden Anteil auf:

$$- \frac{\partial}{\partial \Psi} \overline{\frac{\partial}{\partial x_i} \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \middle| \Psi} = - \frac{\partial}{\partial \Psi} \left( \Gamma \overline{\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2} P_L} + \Gamma \overline{\frac{\partial^2 \Phi'}{\partial x_i^2} \middle| \Psi} P_L \right) . \quad (\text{A.21})$$

## Reaktionsterm

Der Reaktionsterm lautet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Psi} \left( \overline{\omega(\Phi) \middle| \Psi} P_L \right) &= \frac{\partial}{\partial \Psi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega(\Phi) \varrho [\Psi, \Phi] G(x'_i - x_i) dx'_i \\ &= \frac{\partial}{\partial \Psi} \omega(\Psi) P_L \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

## Zusammenfassung

Zusammengefasst lautet die FDF-Transportgleichung für die FDF eines passiven Skalars bei einer DNS des Geschwindigkeitsfeldes:



$$\frac{\partial P_L(\Psi, x_i, t)}{\partial t} + u_i \frac{\partial P_L(\Psi, x_i, t)}{\partial x_i} = \Gamma \frac{\partial^2 P_L(\Psi, x_i, t)}{\partial x_i^2} - \frac{\partial^2}{\partial \Psi^2} \left[ \overline{\Gamma \left( \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \middle| \Psi \right)} P_L(\Psi, x_i, t) \right] - \frac{\partial \omega(\Psi) P_L(\Psi, x_i, t)}{\partial \Psi}. \quad (\text{A.23})$$

